

VŠB – Technická univerzita Ostrava
Fakulta elektrotechniky a informatiky
Katedra fyziky

**Povrchová plazmonová rezonance a disperzní
charakterizace vrstev a analytů**

**Surface plasmon resonance and dispersion
characterization of films and analytes**

VŠB - Technická univerzita Ostrava
Fakulta elektrotechniky a informatiky
Katedra fyziky

Zadání diplomové práce

Student:

Jakub Chylek

Studijní program:

N0533A110006 Aplikovaná fyzika

Téma:

Povrchová plazmonová rezonance a disperzní charakterizace vrstev a analytů
Surface plasmon resonance and dispersion characterization of films and analytes

Jazyk vypracování:

čeština

Zásady pro vypracování:

1. Realizovat experiment s cílem využití jevu povrchové plazmonové rezonance (surface plasmon resonance - SPR) v Kretschmannově uspořádání pro disperzní charakterizaci kovové vrstvy a analytů.
2. Provést měření spektrální závislosti poměru odrazivosti pro SPR v závislosti na úhlu dopadu a určení dielektrické funkce zlata.
3. Provést měření spektrální závislosti změny interferenční fáze pro SPR v závislosti na úhlu dopadu a určení dielektrické funkce zlata.
4. Porovnání získaných dielektrických funkcí s výsledky elipsometrických měření.
5. Využití získaných dielektrických funkcí zlata pro měření disperze kapalného analytu.
6. Provést teoretickou analýzu a porovnat disperzní křivky s experimentálně získanými závislostmi.
7. Zpracovat a vyhodnotit výsledky měření s ohledem na jejich využití při disperzní charakterizaci a specifikovat nepřesnost určení příslušné veličiny.

Seznam doporučené odborné literatury:

1. BORN, M., WOLF, E.: Principles of Optics, Cambridge University Press, Cambridge, 1999.
2. SCHASFOORT, R. B. M., TUDOS, A. J. (eds.): Handbook of Surface Plasmon Resonance, kapitola 2, s. 15-34 (KOOYMAN, R. P. H.: Physics of Surface Plasmon Resonance), The Royal Society of Chemistry, Cambridge, 2008.
3. HOMOLA, J.: Present and future of surface plasmon resonance biosensors. Anal. Bioanal. Chem., 377 (2003), s. 528-539.
4. HLUBINA, P., CIPRIAN, D.: Spectral phase shift of surface plasmon resonance in the Kretschmann configuration: theory and experiment. Plasmonics, 12 (2017), s. 1071-1078.
5. CHLEBUS, R., CHYLEK, J., CIPRIAN, D., HLUBINA, P.: Surface plasmon resonance based measurement of the dielectric function of a thin metal film. Sensors, 18 (2018), 3693.
6. HLUBINA, P., LUNACKOVA, M., CIPRIAN, D.: Phase sensitive measurement of the wavelength dependence of the complex permittivity of a thin gold film using surface plasmon resonance. Opt. Mater. Express, 9 (2019), s. 992-1001.
7. Optimization Toolbox for Use with MATLAB, MathWorks, Massachusetts, 2000.

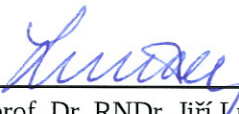
Formální náležitosti a rozsah diplomové práce stanoví pokyny pro vypracování zveřejněné na webových stránkách fakulty.

Vedoucí diplomové práce: **doc. RNDr. Petr Hlubina, CSc.**


Datum zadání: 01.09.2019

Datum odevzdání: 30.04.2020





prof. Dr. RNDr. Jiří Luňáček
vedoucí katedry



prof. Ing. Pavel Brandštetter, CSc.
děkan fakulty

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem tuto diplomovou práci vypracoval samostatně. Uvedl jsem všechny literární prameny a publikace, ze kterých jsem čerpal.

V Ostravě dne 15. 5. 2020

.....

Podpis

Poděkování

Děkuji za podporu v rámci SGS projektu SP 2020/45 se zaměřením na "Optické senzory využívající rezonance povrchových plazmonových a Blochových vln", resp. projektu ERDF/ESF CZ.02.1.01/0.0/0.0/17_048/0007399 s názvem "Nové kompozitní materiály pro environmentální aplikace". Dále bych chtěl poděkovat vedoucímu mé diplomové práce, panu doc. RNDr. Petru Hlubinovi, CSc., za rady a pomoc při zpracování této práce.

Abstrakt

Diplomová práce je zaměřena na charakterizaci materiálů v plazmonické struktuře s využitím jevu povrchové plazmonové rezonance (SPR) v Kretschmannově uspořádání. Součástí práce jsou elipsometrická měření, která slouží k určení optických charakteristik vrstev plazmonické struktury. Na základě této charakterizace je vytvořen teoretický model, který využívá simulace metodou konečných prvků (FEM) v softwaru COMSOL Multiphysics. V rámci této práce byla provedena také měření spektrálních závislostí poměrů odrazivosti a spektrálních fázových posuvů pro více úhlů dopadu pro analyty vzduch/voda. Experimentální výsledky jsou následně porovnány s výsledky teoretického modelu. Na základě porovnání těchto výsledků, které vykazují dobrou shodu, je pak diskutováno využití tohoto způsobu charakterizace pro měření disperze analytů.

Abstract

This thesis is focused on characterization of materials in plasmonic structure using surface plasmon resonance (SPR) in the Kretschmann configuration. Part of this work deals with ellipsometric measurements, which are used to determine optical characteristics of individual layers of the plasmonic structure. Based on these optical characteristics a theoretical model is build, followed by simulations using a finite element method (FEM) in software COMSOL Multiphysics. In this work, the spectral phase shift and spectral dependence of the reflectance ratio are measured for various angles of incidence for analytes air/water. Experimental results are afterwards compared with theoretical model. Based on these results, which are in good agreement with theory, usage of this method of characterization for measurement of disperision properties of analytes is further discussed.

Klíčová slova

povrchová plazmonová rezonance, Kretschmannovo uspořádání, elipsometrie, metoda konečných prvků, COMSOL Multiphysics, fázový posuv, odrazivost, disperze, analyt, voda

Key words

surface plasmon resonance, Kretschmann configuration, ellipsometry, finite element method, COMSOL Multiphysics, phase difference, reflectivity, dispersion, analyte, water

Obsah

Seznam obrázků	8
Seznam tabulek	11
1 Úvod	1
2 Teorie elektromagnetického pole	2
2.1 Maxwellovy rovnice	2
2.1.1 Vlnová rovnice	3
2.2 Polarizace světla	4
2.3 Optické jevy na rozhraní	6
2.3.1 Zákon odrazu a lomu	7
2.3.2 Fresnelovy vztahy	9
2.3.3 Vícevrstvé systémy	11
3 Vlastnosti optických prostředí	13
3.1 Drudeho model	13
3.2 Lorentzův oscilátor	14
3.3 Efektivní prostředí	15
4 Povrchová plazmonová rezonance	17
4.1 Disperzní relace - povrchový plazmon	17
4.2 Vybuzení povrchových plazmonů	18
4.2.1 Optický hranol	19
4.2.2 Optická mřížka	20
4.2.3 Optická vlákna	21
5 Elipsometrie a charakterizace prostředí	22
5.1 Elipsometrické měření	22
5.2 Fitování naměřených dat	23
5.3 Charakterizace jednotlivých prostředí	23
5.3.1 Substrát - sklo SF10	23
5.3.2 Hranol - sklo SF10	24
5.3.3 Vrstva zlata	25
5.3.4 Vrstva efektivního prostředí	27
5.3.5 Adhezní vrstva chromu	27
6 Teoretický model	29
6.1 Plazmonická struktura	29
6.2 Optické vlastnosti prostředí	30
6.2.1 Vzduch	30
6.2.2 Voda	31
6.2.3 Imerní kapalina	32

7	Modelování v software COMSOL Multiphysics	33
7.1	Metoda konečných prvků (FEM)	33
7.2	Průběh elektrického a magnetického pole	34
7.3	Spektrální a úhlová závislost odrazivosti	35
8	Experimentální část I.	37
8.1	Experimentální sestava	37
8.2	Měření pro vzduch	38
8.3	Měření pro vodu	40
8.4	Určení dielektrické funkce zlata z měření poměrů odrazivosti	42
9	Experimentální část II.	44
9.1	Experimentální sestava	44
9.2	Měření pro vzduch	46
9.3	Měření pro vodu	48
9.4	Určení dielektrické funkce zlata z měření fázového posuvu	50
10	Diskuze výsledků experimentu	53
11	Závěr	55
	Literatura	57

Seznam obrázků

2.1	Schematický nákres elipticky polarizované vlny.	5
2.2	Schematický nákres lineárně polarizované vlny.	5
2.3	Schematický nákres kruhově polarizované vlny.	5
2.4	Schematický nákres chování vektoru elektrické indukce \vec{D} na rozhraní dvou prostředí.	6
2.5	Schematický nákres chování vektoru elektrické intenzity \vec{E} na rozhraní dvou prostředí.	7
2.6	Schematický nákres dopadu, odrazu a lomu vlny na rozhraní.	8
2.7	Schematický nákres dopadu, odrazu a lomu p -polarizované vlny na rozhraní. . . .	9
2.8	Schematický nákres dopadu, odrazu a lomu s -polarizované vlny na rozhraní. . . .	10
2.9	Schematický nákres vícenásobného odrazu a průchodu pro tenkou vrstvou.	11
3.1	Koule v homogenním elektrickém poli.	15
4.1	Schematický nákres rozhraní dielektrika a kovu.	17
4.2	Disperzní relace povrchového plazmonu na rozhraní kovu a vzduchu (červená) a kovu a dielektrika (černá).	18
4.3	Schematický nákres Kretschmannovy konfigurace.	19
4.4	Schematický nákres Ottovy konfigurace.	20
4.5	Schematický nákres buzení povrchových plazmonů na optické mřížce.	20
4.6	Schematický nákres konstrukce optického vlákna s SPR strukturou.	21
5.1	Schematický nákres elipsometru. Světelná vlna ze zdroje (Z), jejíž polarizační stav je určen polarizátorem (P) a kompenzátorem (K_1) dopadá na vzorek pod úhlem α . Na základě interakce světelné vlny se vzorkem se mění její polarizační stav, který je poté určen po průchodu analyzátozem (A) a kompenzátorem (K_2) na základě odezvy zachycené na detektoru (D).	22
5.2	Schematický nákres čtyř vrstev plazmonické struktury, která je tvořena substrátem SF10 o tloušťce $t_4 = 1$ mm, adhezní vrstvou chromu, budící vrstvy zlata a efektivním prostředím, které simuluje drsnost povrchu.	22
5.3	Prvky NCS matice substrátu SF10 pro úhel dopadu 60°	24
5.4	Určené optické konstanty substrátu SF10.	24
5.5	Prvky NCS matice hranolu SF10 pro úhel dopadu 60°	24
5.6	Reálná část ρ v závislosti na vlnové délce, kde červená plná čára reprezentuje naměřená data a modrá přerušovaná čára reprezentuje fit.	25
5.7	Imaginární ρ v závislosti na vlnové délce, kde červená plná čára reprezentuje naměřená data a modrá přerušovaná čára reprezentuje fit.	25
5.8	Reálná část komplexní dielektrické funkce zlata v závislosti na vlnové délce. . . .	26
5.9	Imaginární část komplexní dielektrické funkce zlata v závislosti na vlnové délce. .	26
5.10	Reálná část komplexní dielektrické funkce efektivního prostředí v závislosti na vlnové délce.	27
5.11	Imaginární část komplexní dielektrické funkce efektivního prostředí v závislosti na vlnové délce.	27
5.12	Reálná část komplexní dielektrické funkce chromu v závislosti na vlnové délce. . .	28
5.13	Imaginární část komplexní dielektrické funkce chromu v závislosti na vlnové délce.	28
6.1	Schematický nákres Kretschmannovy konfigurace s rovnostranným hranolem. . .	29
6.2	Schematický nákres plazmonické struktury.	29
6.3	Závislost indexu lomu vzduchu na vlnové délce.	30

6.4	Závislost indexu lomu vody na vlnové délce.	31
6.5	Závislost indexu lomu imerzní kapaliny na vlnové délce.	32
7.1	Závislost velikosti elektrického pole na souřadnicích na rozhraní kovu a dielektrika pro úhel dopadu $\theta = 55^\circ$	34
7.2	Závislost velikosti magnetického pole (z komponenty) na souřadnicích na rozhraní kovu a dielektrika pro úhel dopadu $\theta = 55^\circ$	34
7.3	Závislost odrazivosti na úhlu dopadu vypočtená v softwaru COMSOL Multiphysics.	35
7.4	Závislost odrazivosti na úhlu dopadu vypočtená v softwaru MATLAB.	35
7.5	Závislost odrazivosti na vlnové délce vypočtená v softwaru COMSOL Multiphysics.	36
7.6	Závislost odrazivosti na vlnové délce vypočtená v softwaru MATLAB.	36
8.1	Schématický nákres experimentální sestavy určené k měření poměru odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$	37
8.2	Spektrální závislost naměřených poměrů odrazivostí pro úhly dopadu $36, 76^\circ$ až $41, 46^\circ$ pro vzduch.	38
8.3	Spektrální závislost teoretických poměrů odrazivostí pro úhly dopadu $36, 76^\circ$ až $41, 46^\circ$ pro vzduch.	38
8.4	Srovnání experimentální a teoretické závislosti rezonanční vlnové délky λ_r na úhlu dopadu θ pro vzduch.	40
8.5	Spektrální závislost naměřených poměrů odrazivostí pro úhly dopadu $53, 29^\circ$ až $60, 00^\circ$ pro vodu.	40
8.6	Spektrální závislost teoretických poměrů odrazivostí pro úhly dopadu $53, 29^\circ$ až $60, 00^\circ$ pro vodu.	40
8.7	Srovnání experimentální a teoretické závislosti rezonanční vlnové délky λ_r na úhlu dopadu θ pro vodu.	41
8.8	Experimentální závislost poměru odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ (červeně) a fit (modře) pro úhel dopadu $39, 16^\circ$ pro vzduch.	42
8.9	Experimentální závislost poměru odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ (červeně) a fit (modře) pro úhel dopadu $37, 01^\circ$ pro vzduch.	42
8.10	Reálná část komplexní dielektrické funkce zlata v závislosti na vlnové délce určená z elipsometrického měření (černě) v porovnání s hodnotami určenými z fitování poměrů odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ (křížky červeně) a fit Drudeho-Lorentzova modelu (červeně).	42
8.11	Imaginární část komplexní dielektrické funkce zlata v závislosti na vlnové délce určená z elipsometrického měření (černě) v porovnání s hodnotami určenými z fitování poměru odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ (křížky modře) a fit Drudeho-Lorentzova modelu (modře).	42
8.12	Závislost rezonanční vlnové délky λ_r na úhlu dopadu θ naměřených spektrálních závislostí poměrů odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ pro vzduch (křížky červeně) a teoretická závislost určená z výsledných parametrů fitu Drudeho-Lorentzova modelu (červeně).	43
9.1	Schématický nákres experimentální sestavy určené k měření fázového posuvu $\Delta(\lambda)$	44
9.2	Spektrální interferogram vzniku povrchových plazmonů pro vzduch (černá) a referenční spektrální interferogram (červená).	45
9.3	Naměřený fázový posuv pro úhly dopadu $36, 76^\circ$ až $41, 46^\circ$ pro vzduch.	46
9.4	Teoretický fázový posuv pro úhly dopadu $36, 76^\circ$ až $41, 46^\circ$ pro vzduch.	46
9.5	Derivace fázového posuvu experimentálních závislostí pro úhly dopadu $36, 76^\circ$ až $41, 46^\circ$ pro vzduch.	46

9.6	Derivace fázového posuvu teoretických závislostí pro úhly dopadu $36,76^\circ$ až $41,46^\circ$ pro vzduch.	46
9.7	Srovnání experimentální a teoretické závislosti rezonanční vlnové délky λ_r na úhlu dopadu θ pro vzduch.	48
9.8	Naměřený fázový posuv pro úhly dopadu $53,29^\circ$ až $60,00^\circ$ pro vodu.	48
9.9	Teoretický fázový posuv pro úhly dopadu $53,29^\circ$ až $60,00^\circ$ pro vodu.	48
9.10	Derivace fázového posuvu experimentálních závislostí pro úhly dopadu $53,29^\circ$ až $60,00^\circ$ pro vodu.	49
9.11	Derivace fázového posuvu teoretických závislostí pro úhly dopadu $53,29^\circ$ až $60,00^\circ$ pro vodu.	49
9.12	Srovnání experimentální a teoretické závislosti rezonanční vlnové délky λ_r na úhlu dopadu θ pro vodu.	50
9.13	Experimentální závislost derivace fázového posuvu $d\Delta(\lambda)/d\lambda$ (červeně) a fit (modře) pro úhel dopadu $39,16^\circ$ pro vzduch.	50
9.14	Experimentální závislost derivace fázového posuvu $d\Delta(\lambda)/d\lambda$ (červeně) a fit (modře) pro úhel dopadu $37,01^\circ$ pro vzduch.	50
9.15	Reálná část komplexní dielektrické funkce zlata v závislosti na vlnové délce určená z elipsometrického měření (černě) v porovnání s hodnotami určenými z fitování derivací fázových posuvů $d\Delta(\lambda)/d\lambda$ (křížky červeně) a fit Drudeho-Lorentzova modelu (červeně).	51
9.16	Imaginární část komplexní dielektrické funkce zlata v závislosti na vlnové délce určená z elipsometrického měření (černě) v porovnání s hodnotami určenými z fitování derivací fázových posuvů $d\Delta(\lambda)/d\lambda$ (křížky modře) a fit Drudeho-Lorentzova modelu (modře).	51
9.17	Závislost rezonanční vlnové délky λ_r na úhlu dopadu θ naměřených spektrálních závislostí derivací fázových posuvů $d\Delta(\lambda)/d\lambda$ pro vzduch (křížky červeně) a teoretická závislost určená z výsledných parametrů fitu Drudeho-Lorentzova modelu (červeně).	52

Seznam tabulek

5.1	Parametry Drudeho-Lorentzova modelu zlata.	25
5.2	Parametry tloušťek zlata a efektivního prostředí.	26
5.3	Parametry Drudeho-Lorentzova modelu chromu.	27
6.1	Koeficienty pro výpočet indexu lomu vzduchu.	30
6.2	Koeficienty Sellmeierovy formule pro vodu.	31
6.3	Koeficienty Cauchyho formule pro imerzní kapalinu.	32
8.1	Hodnoty úhlů dopadu na SPR sestavu θ , na stěnu hranolu α_0 a experimentálních a teoretických hodnot rezonančních vlnových délek λ_r pro vzduch.	39
8.2	Hodnoty úhlů dopadu na SPR sestavu θ , na stěnu hranolu α_0 a experimentálních a teoretických hodnot rezonančních vlnových délek λ_r pro vodu.	41
8.3	Parametry Drudeho-Lorentzova modelu zlata určené z elipsometrického měření v porovnání s parametry určenými z naměřených spektrálních závislostí poměrů odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$	43
9.1	Hodnoty úhlů dopadu na SPR sestavu θ , na stěnu hranolu α_0 a experimentálních a teoretických hodnot rezonančních vlnových délek λ_r pro vzduch.	47
9.2	Hodnoty úhlů dopadu na SPR sestavu θ , na stěnu hranolu α_0 a experimentálních a teoretických hodnot rezonančních vlnových délek λ_r pro vodu.	49
9.3	Parametry Drudeho-Lorentzova modelu zlata určené z elipsometrického měření v porovnání s parametry určenými z naměřených spektrálních závislostí derivací fázových posuvů $d\Delta(\lambda)/d\lambda$	51

1 Úvod

Povrchová plazmonová rezonance (SPR) je jevem široce využívaným v mnoha odvětvích přírodních věd jako například fyzika, chemie nebo biologie [1]. Jev povrchové plazmonové rezonance lze chápat jako rezonanční efekt vázaný na povrchové elektromagnetické vlny spojené s oscilacemi volných elektronů na rozhraní kovu a dielektrika. Tyto povrchové elektromagnetické vlny jsou silně vázány na rozhraní a jejich pole dosahuje maximální hodnoty na povrchu, kde se vzdalováním od rozhraní exponenciálně klesá [2].

Vybuzení povrchových plazmonů lze dosáhnout například v Kretschmannově uspořádání [3,4], kde při dopadu p -polarizované vlny při splnění rezonanční podmínky dochází k zeslabenému úplnému odrazu a vybuzení povrchových plazmonů evanescentní vlnou. Jejich vznik můžeme sledovat například na spektrální závislosti poměrů odrazivosti $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$, kde na určité vlnové délce, kterou nazýváme rezonanční, projeví jako minimum odrazivosti (dip). Poloha minima je velice citlivá na změny indexu lomu zkoumaného analytu, a proto je jev povrchové plazmonové rezonance využíván pro senzorické účely [5,6].

Cílem této diplomové práce je charakterizace plazmonické struktury v Kretschmannově uspořádání. První část práce je věnována základním poznatkům z teorie elektromagnetického pole a základům fyziky povrchových plazmonů. Součástí práce je elipsometrické měření, které slouží k určení optických charakteristik hranolu SF10, substrátu SF10, vrstvy zlata a efektivního prostředí. Na základě této charakterizace je sestaven teoretický model, který využívá simulace metodou konečných prvků (FEM) v softwaru COMSOL Multiphysics pro srovnání analytického a numerického řešení.

V rámci této práce byla provedena také měření spektrálních závislostí poměrů odrazivosti $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ a spektrálních fázových posuvů $\Delta(\lambda)$ mezi p - a s -polarizovaným světlem, který je určen metodou spektrální interferometrie [7]. Měření byla provedena pro více úhlů dopadu pro analyty vzduch/voda. Výsledky experimentu jsou porovnány s teoretickými výsledky na základě závislostí rezonanční vlnové délky λ_r na úhlu dopadu na plazmonickou strukturu θ . Porovnání experimentálních a teoretických výsledků vykazuje dobrou shodu pro několik úhlů dopadu pro měření poměrů odrazivosti $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ a spektrálních fázových posuvů $\Delta(\lambda)$, kde analytem je vzduch. Při porovnání experimentálních a teoretických výsledků pro vodu však dochází k nesouladu mezi experimentem a teoretickým modelem. Na základě těchto výsledků, je pak diskutováno využití tohoto způsobu charakterizace pro měření disperze analytů.

2 Teorie elektromagnetického pole

Interakci elektromagnetického záření s daným prostředím lze popsat pomocí Maxwellových rovnic. Tato část práce je tedy věnována fyzikálním zákonitostem vycházejícím z teorie elektromagnetického pole [8], které tvoří základ pro pochopení problematiky této práce.

2.1 Maxwellovy rovnice

K úplnému popisu chování elektromagnetického pole využijeme následujících Maxwellových rovnic v diferenciálním tvaru:

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho, \quad (2.1)$$

$$\nabla \times \vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0, \quad (2.2)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad (2.3)$$

$$\nabla \times \vec{H} - \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \vec{j}, \quad (2.4)$$

kde rovnice (2.1) představuje Gaussův zákon pro elektrické pole, rovnice (2.2) vyjadřuje Faradayův zákon elektromagnetické indukce, rovnice (2.3) je známa jako Gaussův zákon pro magnetické pole a poslední rovnice (2.4), popisující chování elektromagnetického pole je známa jako Ampérův-Maxwellův zákon. Veličiny \vec{D} a \vec{B} jsou vektory elektrické a magnetické indukce, \vec{E} a \vec{H} jsou vektory elektrické a magnetické intenzity, ρ je hustota volného náboje, \vec{j} je vektor hustoty proudu a $\nabla = (\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z})$ je diferenciální operátor nabla. Dále je nutno uvést vedlejší Maxwellovy rovnice, které dávají do souvislosti veličiny elektrického pole \vec{E} , \vec{D} a veličiny magnetického pole \vec{H} , \vec{B} a prostředí, kterým se elektromagnetická vlna šíří, známé také jako materiálové vztahy:

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = \epsilon_0 \epsilon_r \vec{E}, \quad (2.5)$$

$$\vec{B} = \mu_0 (\vec{H} + \vec{M}) = \mu_0 \mu_r \vec{H}, \quad (2.6)$$

kde v rovnici (2.5) je \vec{P} vektor polarizace, ϵ_0 permitivita vakua, ϵ_r relativní permitivita, pro které platí následující vztah $\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_r$, přičemž ϵ má smysl permitivity prostředí. Jistou podobnost pak můžeme sledovat v rovnici (2.6), kde \vec{M} je vektor magnetizace, μ_0 permeabilita vakua, μ_r relativní permeabilita, pro které platí vztah $\mu = \mu_0 \mu_r$, přičemž μ má smysl permeability prostředí. Je nutno však dodat, že tyto materiálové vztahy platí jen pro izotropní prostředí, což znamená, že permitivita a permeabilita takového prostředí jsou skalárními veličinami. Dalšími rozšířeními vedlejších Maxwellových rovnic jsou rovnice:

$$\vec{j} = \gamma \vec{E}, \quad (2.7)$$

$$\nabla \cdot \vec{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0. \quad (2.8)$$

kde (2.7) je Ohmův zákon a (2.8) rovnice kontinuity. Ohmův zákon udává přímý vztah mezi vektorem proudové hustoty \vec{j} a vektorem intenzity elektrického pole \vec{E} prostřednictvím konstanty úměrnosti γ , jež představuje měrnou vodivost daného prostředí a rovnice kontinuity vyplývá přímo z hlavních Maxwellových rovnic.

2.1.1 Vlnová rovnice

Z Maxwellových rovnic lze odvodit významnou rovnici - vlnovou rovnici, která popisuje chování elektromagnetických vln. Uvažujme Maxwellovy rovnice v prostředí, které je homogenní, nevodivé, nemagnetické, izotropní, bez volných nábojů a konvenčních proudů:

$$\nabla \cdot \vec{D} = 0, \quad (2.9)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (2.10)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad (2.11)$$

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}. \quad (2.12)$$

Aplikujeme-li operátor rotace na rovnice (2.10) a (2.12) dostáváme:

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{E}) = -\frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \vec{B}) = -\mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}, \quad (2.13)$$

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{B}) = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \vec{E}) = -\mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2}. \quad (2.14)$$

Na levé straně rovnice (2.13) vystupují dva operátory rotace, které můžeme upravit do tvaru:

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{E}) = \nabla(\nabla \cdot \vec{E}) - (\nabla \cdot \nabla) \vec{E}. \quad (2.15)$$

Člen $\nabla(\nabla \cdot \vec{E})$, který vystupuje v rovnici (2.15), je roven nule, takže levou stranu rovnice (2.13) a analogicky také (2.14) můžeme psát:

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{E}) = \nabla(\nabla \cdot \vec{E}) - (\nabla \cdot \nabla) \vec{E} = 0 - \nabla^2 \vec{E}, \quad (2.16)$$

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{B}) = \nabla(\nabla \cdot \vec{B}) - (\nabla \cdot \nabla) \vec{B} = 0 - \nabla^2 \vec{B}. \quad (2.17)$$

Dosazením těchto výsledků do rovnic (2.13), (2.14) získáváme vlnové rovnice pro elektrické a magnetické pole:

$$\nabla^2 \vec{E} - \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0, \quad (2.18)$$

$$\nabla^2 \vec{B} - \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} = 0. \quad (2.19)$$

Významné řešení vlnové rovnice je rovinná monochromatická vlna, jejíž závislost v prostoru a čase je pro elektrické a magnetické pole dána rovnicemi:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 \cos(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}) = \vec{E}_0 e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}, \quad (2.20)$$

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{B}_0 \cos(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}) = \vec{B}_0 e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}. \quad (2.21)$$

kde \vec{E}_0 a \vec{B}_0 představují amplitudu vektoru elektrické intenzity a magnetické indukce, \vec{r} je polohový vektor a \vec{k} je vlnový vektor, jehož směr je souhlasný se směrem šíření vlny. Velikost vlnového vektoru \vec{k} můžeme vyjádřit jako:

$$|\vec{k}| = k = n \frac{\omega}{c} = n \frac{2\pi}{\lambda_0}, \quad (2.22)$$

kde k je vlnové číslo, λ_0 je vlnová délka ve vakuu a n je index lomu prostředí, kterým se vlna šíří. Z Maxwellových rovnic (2.9), (2.10) a (2.11) navíc plyne:

$$\vec{k} \cdot \vec{E} = 0, \quad (2.23)$$

$$\vec{k} \cdot \vec{E} = \omega \vec{B}, \quad (2.24)$$

$$\vec{k} \cdot \vec{B} = 0, \quad (2.25)$$

z čehož vyplývá, že se jedná o vlnění příčné. Tedy vektor elektrické intenzity \vec{E} , vektor magnetické indukce \vec{B} a vlnový vektor \vec{k} , kterými je elektromagnetická vlna popsána, jsou na sebe navzájem kolmé.

2.2 Polarizace světla

Polarizace světla souvisí s příčností elektromagnetické vlny a je určena složkami vektoru intenzity elektrického pole $\vec{E}(\vec{r}, t)$. Uvažujme tedy monochromatickou vlnu, která se šíří ve směru osy z a její vektor intenzity elektrického pole leží v rovině $x - y$, který lze vyjádřit jako:

$$\vec{E}(z, t) = a_x \cos(\omega t - kz + \phi_x) \vec{i} + a_y \cos(\omega t - kz + \phi_y) \vec{j}, \quad (2.26)$$

kde pro jeho složky platí:

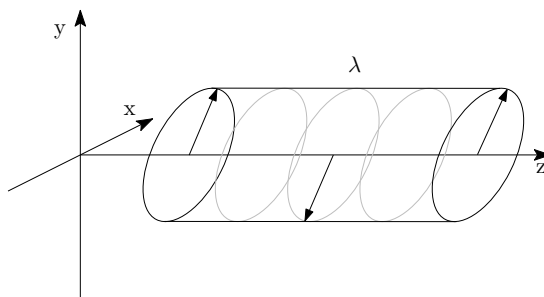
$$E_x = a_x \cos(\omega t - kz + \phi_x), \quad (2.27)$$

$$E_y = a_y \cos(\omega t - kz + \phi_y). \quad (2.28)$$

Rovnice (2.27) a (2.28) jsou parametrické rovnice elipsy:

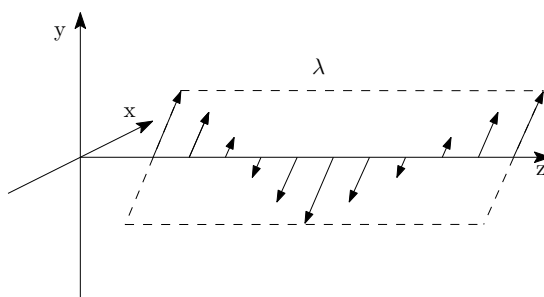
$$\frac{E_x^2}{a_x^2} + \frac{E_y^2}{a_y^2} - 2 \frac{E_x}{a_x} \frac{E_y}{a_y} \cos \phi = \sin^2 \phi, \quad (2.29)$$

kde $\phi = \phi_y - \phi_x$ je fázový rozdíl. Koncový bod vektoru \vec{E} bude tedy v rovině $x - y$ opisovat elipsu a budeme hovořit o eliptické polarizaci viz. obrázek (2.1). Tvar elipsy bude záviset na poměru amplitud $\frac{a_y}{a_x}$ a fázovém rozdílu ϕ .



Obrázek 2.1: Schematický náčrt elipticky polarizované vlny.

Bude-li jedna ze složek a_x nebo a_y rovna nule, světlo bude polarizované ve směru nenulové složky. V takovém případě hovoříme o lineární polarizaci viz. obrázek (2.2). V případě, že pro fázový rozdíl platí $\phi = n\pi$, kde $n = 0, \pm 1, \dots$, vlna bude také lineárně polarizovaná.

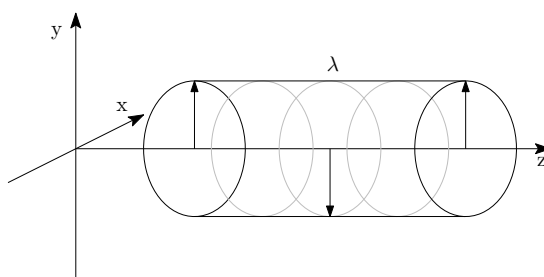


Obrázek 2.2: Schematický náčrt lineárně polarizované vlny.

V případě, že $a_x = a_y$ se rovnice (2.29) redukuje na tvar:

$$E_x^2 + E_y^2 = a^2, \quad (2.30)$$

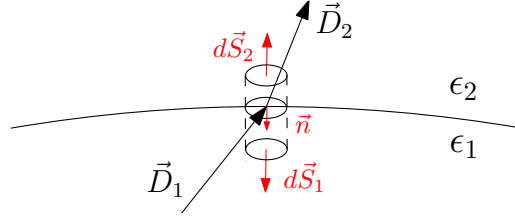
což je rovnice kružnice. Eliptický průřez, který opisuje koncový bod elektrického pole vlny se mění na kruhový a hovoříme tedy o kruhové polarizaci viz. obrázek (2.3). V závislosti na fázovém rozdílu rozlišujeme pravotočivou a levotočivou kruhovou polarizaci. Pro fázový rozdíl $\phi = +\pi/2$ dochází k rotaci koncového bodu elektrického pole vlny ve směru hodinových ručiček, sledujeme-li postup vlny ve směru opačném k jejímu šíření. V takovém případě hovoříme o pravotočivé kruhové polarizaci. Pro případ $\phi = -\pi/2$ dochází k rotaci proti směru hodinových ručiček a levotočivé kruhové polarizaci.



Obrázek 2.3: Schematický náčrt kruhově polarizované vlny.

2.3 Optické jevy na rozhraní

K odvození vztahů, které platí na rozhraní dvou prostředí, respektive určení hraničních podmínek, využijeme Maxwellových rovnic.



Obrázek 2.4: Schematický náčrtek chování vektoru elektrické indukce \vec{D} na rozhraní dvou prostředí.

Na rozhraní dvou dielektrik, tak jak je tomu na obrázku (2.4), využijeme Gaussovy věty v integrálním tvaru a pro oblast vymezenou uzavřenou válcovou plochou, kde její výšku považujeme za zanedbatelnou, můžeme psát:

$$\oint_S \vec{D} \cdot d\vec{S} = Q = \int \sigma dS, \quad (2.31)$$

kde σ je plošná hustota náboje a pro $h \rightarrow 0$ platí $\int \sigma dS = \lim_{h \rightarrow 0} \int \rho dV$. Zanedbáme-li příspěvek pláště, můžeme pro příspěvky horní a dolní podstavy psát:

$$\int \vec{D}_1 \cdot d\vec{S}_1 + \int \vec{D}_2 \cdot d\vec{S}_2 = \int (D_{2n} - D_{1n}) dS, \quad (2.32)$$

z čehož plyne:

$$D_{2n} - D_{1n} = \sigma. \quad (2.33)$$

Analogicky bychom řešili tento problém pro magnetické pole na rozhraní dvou magnetik s využitím Gaussova zákona pro magnetické pole:

$$\oint \vec{B} \cdot d\vec{S} = 0. \quad (2.34)$$

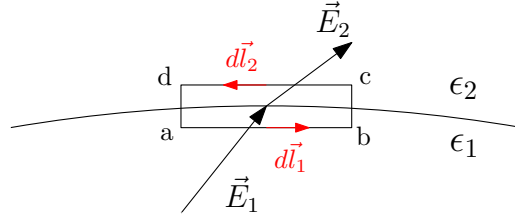
Při zanedbání pláště dostaneme pro příspěvky horní a dolní podstavy:

$$\int \vec{B}_1 \cdot d\vec{S}_1 + \int \vec{B}_2 \cdot d\vec{S}_2 = \int (B_{2n} - B_{1n}) dS, \quad (2.35)$$

z čehož plyne:

$$B_{2n} - B_{1n} = 0, \quad (2.36)$$

takže z rovnice (2.36) vyplývá podmínka spojitosti magnetického pole, to znamená že normálová složka vektoru magnetické indukce se na rozhraní dvou magnetik mění spojitě. Pokud není na rozhraní dvou dielektrik přítomen plošný náboj o hustotě σ , tak tato spojitost platí také pro normálové složky vektoru elektrické indukce, což vyplývá z rovnice (2.33).



Obrázek 2.5: Schematický náčrt chování vektoru elektrické intenzity \vec{E} na rozhraní dvou prostředí.

Na rozhraní dvou dielektrik, tak jak je tomu na obrázku (2.5), využijeme Faradayova zákona v integrálním tvaru:

$$\oint \vec{E} \cdot d\vec{l} = -\frac{\partial \Phi_B}{\partial t}, \quad (2.37)$$

a pro vymezenou oblast, kde vzdálenosti $b \rightarrow c$ a $d \rightarrow a$ považujeme za zanedbatelné, můžeme psát:

$$\int_a^b \vec{E}_1 \cdot d\vec{l}_1 + \int_c^d \vec{E}_2 \cdot d\vec{l}_2 = \int_a^b (E_{2t} - E_{1t}) dl, \quad (2.38)$$

z čehož plyne:

$$E_{2t} = E_{1t}, \quad (2.39)$$

Analogicky lze řešit tento problém pro magnetické pole na rozhraní dvou magnetik s využitím Ampérova-Maxwellova zákona v integrálním tvaru:

$$\oint \vec{H} \cdot d\vec{l} = I + \frac{\partial \Phi_E}{\partial t}, \quad (2.40)$$

kde pro vymezenou oblast považujeme vzdálenosti $b \rightarrow c$ a $d \rightarrow a$ za zanedbatelné a můžeme psát:

$$\int_a^b \vec{H}_1 \cdot d\vec{l}_1 + \int_c^d \vec{H}_2 \cdot d\vec{l}_2 = \int_a^b (H_{2t} - H_{1t}) dl, \quad (2.41)$$

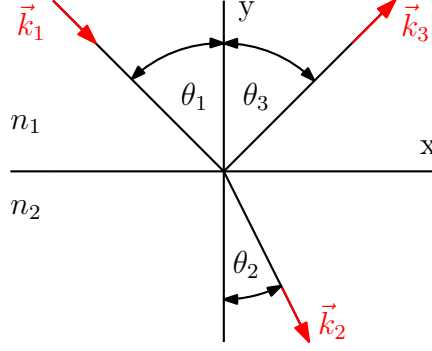
z čehož plyne:

$$H_{2t} - H_{1t} = j_s, \quad (2.42)$$

takže z rovnice (2.39) vyplývá podmínka spojitosti elektrického pole, to znamená že tečná složka vektoru elektrické intenzity se na rozhraní dvou dielektrik mění spojitě. Pokud na rozhraní dvou magnetik neteče plošný proud j_s , tak platí spojitost pro tečné složky vektoru magnetické intenzity, což vyplývá z rovnice (2.42).

2.3.1 Zákon odrazu a lomu

Uvažujme rozhraní dvou prostředí různých optických vlastností, které jsou popsány jejich indexy lomu n_1 a n_2 . Při dopadu rovinné monochromatické vlny podle obrázku (2.6) lze rozlišit vlnu dopadající na rozhraní, která se odrazí zpátky do prvního prostředí a vlnu, která prochází rozhraním a šíří se dále druhým prostředím.



Obrázek 2.6: Schématický nákres dopadu, odrazu a lomu vlny na rozhraní.

Vlny lze popsat pomocí jejich průběhů elektrického pole a magnetického pole. Pro vlnu dopadající bude platit:

$$\vec{E}_1(\vec{r}, t) = \vec{E}_{01} e^{i[\omega_1 t - (k_{1x}x + k_{1y}y)]}. \quad (2.43)$$

$$\vec{H}_1(\vec{r}, t) = \vec{H}_{01} e^{i[\omega_1 t - (k_{1x}x + k_{1y}y)]}. \quad (2.44)$$

Průběh vlny, která prochází do druhého prostředí popíšeme jako:

$$\vec{E}_2(\vec{r}, t) = \vec{E}_{02} e^{i[\omega_2 t - (k_{2x}x + k_{3y}y)]}. \quad (2.45)$$

$$\vec{H}_2(\vec{r}, t) = \vec{H}_{02} e^{i[\omega_2 t - (k_{2x}x + k_{3y}y)]}. \quad (2.46)$$

Pro odraženou vlnu bude tedy platit:

$$\vec{E}_3(\vec{r}, t) = \vec{E}_{03} e^{i[\omega_3 t - (k_{3x}x + k_{3y}y)]}. \quad (2.47)$$

$$\vec{H}_3(\vec{r}, t) = \vec{H}_{03} e^{i[\omega_3 t - (k_{3x}x + k_{3y}y)]}. \quad (2.48)$$

kde vektory \vec{E}_{0i} a \vec{H}_{0i} představují amplitudy vln, ω_i jejich úhlové frekvence a k_{ix} a k_{iy} jsou složky vlnového vektoru těchto vln. S ohledem na hraniční podmínky na rozhraní ($y = 0$) platí rovnost tečných složek intenzit elektrického a magnetického pole. To znamená, že výsledné pole bude dáno superpozicí dopadající a odražené vlny v prvním prostředí a prošlá vlna bude tvořit výsledné pole ve druhém prostředí. Tedy platí následující rovnice:

$$E_{01t} e^{i(\omega_1 t - k_{1x}x)} + E_{03t} e^{i(\omega_3 t - k_{3x}x)} = E_{02t} e^{i(\omega_2 t - k_{2x}x)}. \quad (2.49)$$

$$H_{01t} e^{i(\omega_1 t - k_{1x}x)} + H_{03t} e^{i(\omega_3 t - k_{3x}x)} = H_{02t} e^{i(\omega_2 t - k_{2x}x)}. \quad (2.50)$$

Hraniční podmínky musí být splněny pro všechna x a všechny časy t , v důsledku čehož platí následující rovnice:

$$\omega_1 = \omega_2 = \omega_3, \quad (2.51)$$

$$k_{1x} = k_{2x} = k_{3x}. \quad (2.52)$$

Úhlová frekvence je tedy pro všechny vlny stejná, což platí i pro x -ovou složku vlnového vektoru dopadající, odražené a prošlé vlny. Zabývejme se tedy nejdříve vztahem $k_{1x} = k_{3x}$ mezi vlnou dopadající a odraženou. Vyjádřením velikosti vlnového vektoru z rovnice (2.22) při platnosti rovnice (2.52) tedy vyplývá, že $k_{1y}^2 = k_{3y}^2$, respektive:

$$k_{3y} = \pm k_{1y}. \quad (2.53)$$

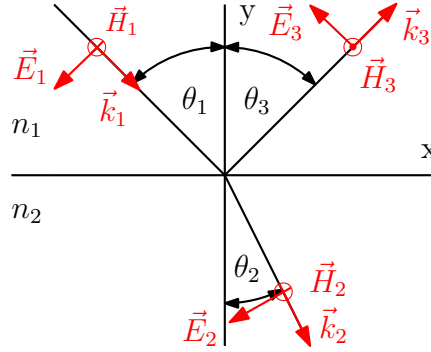
Řešení, které má fyzikální smysl plynoucí z obrázku (2.6) má však jen záporná složka k_{1y} . Rovnici (2.53) lze tedy chápat jako vyjádření zákona odrazu. Zabýváme-li se zbývajícím případem vlny dopadající a vlny šířící se druhým prostředím, pro které platí $k_{1x} = k_{2x}$, lze dojít k rovnici:

$$n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2, \quad (2.54)$$

která představuje Snellův zákon lomu.

2.3.2 Fresnelovy vztahy

Uvažujme obdobně jako na obrázku (2.6) rozhraní dvou prostředí, které jsou popsány jejich indexy lomu n_1 a n_2 . Avšak v tomto případě budeme rozlišovat p - a s -polarizovanou vlnu.



Obrázek 2.7: Schématický náčrt dopadu, odrazu a lomu p -polarizované vlny na rozhraní.

Na obrázku (2.7) lze vidět, že pro p -polarizovanou vlnu zaujímá vektor intenzity magnetického pole \vec{H} směr rovnoběžný s rovinou rozhraní a vektor intenzity elektrického pole \vec{E} je k němu kolmý. Vycházíme-li opět z hraničních podmínek, které jsme si odvodili z Maxwellových rovnic, platí:

$$E_1 \cos \theta_1 + E_3 \cos \theta_3 = E_2 \cos \theta_2, \quad (2.55)$$

$$H_1 - H_3 = H_2. \quad (2.56)$$

Úpravou Maxwellovy rovnice (2.2) lze dojít ke vztahu:

$$H = \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} E, \quad (2.57)$$

který lze použít k přepsání rovnice (2.56) do následujícího tvaru:

$$\sqrt{\frac{\epsilon_1}{\mu_1}} E_1 - \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\mu_1}} E_3 = \sqrt{\frac{\epsilon_2}{\mu_2}} E_2. \quad (2.58)$$

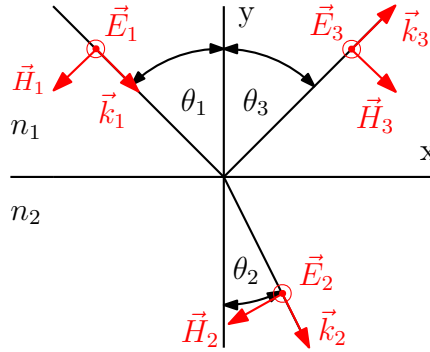
K odvození Fresnelových koeficientů odrazivosti a propustnosti hledáme vyjádření pro poměry amplitud $r = \frac{E_3}{E_1}$ vlny odražené ku vlně dopadající a $t = \frac{E_2}{E_1}$ vlny prošlé ku vlně dopadající. Proto s použitím vztahu pro index lomu $n = c\sqrt{\epsilon\mu}$ a jeho dosazením do rovnice (2.58) lze dojít k vyjádření:

$$n_1 \frac{(E_1 - E_3)}{\mu_1} = \frac{n_2 E_2}{\mu_2}. \quad (2.59)$$

S použitím rovnice (2.59) vyjádříme amplitudu vlny prošlé E_2 a tu dosadíme do (2.55) a za předpokladu, že se jedná o nemagnetické prostředí, získáme známý předpis Fresnelových amplitudových koeficientů odrazivosti a propustnosti pro p -polarizovanou vlnu:

$$r_p = \frac{n_2 \cos \theta_1 - n_1 \cos \theta_2}{n_2 \cos \theta_1 + n_1 \cos \theta_2}, \quad (2.60)$$

$$t_p = \frac{2n_1 \cos \theta_1}{n_2 \cos \theta_1 + n_1 \cos \theta_2}. \quad (2.61)$$



Obrázek 2.8: Schématický nákres dopadu, odrazu a lomu s -polarizované vlny na rozhraní.

Nyní rozlišme případ s -polarizované vlny dopadající na rozhraní dvou prostředí. Z obrázku (2.8) lze vidět, že pro s -polarizovanou vlnu, zaujímá vektor intenzity elektrického pole \vec{E} směr rovnoběžný s rovinou rozhraní a vektor intenzity magnetického pole \vec{H} je k němu kolmý. Vycházíme-li opět z hraničních podmínek, které jsme si odvodili z Maxwellových rovnic, tak platí:

$$E_1 + E_3 = E_2, \quad (2.62)$$

$$-H_1 \cos \theta_1 + H_3 \cos \theta_3 = -H_2 \cos \theta_2. \quad (2.63)$$

Dosazením rovnice (2.57) do (2.63) obdržíme rovnici ve tvaru:

$$-\sqrt{\frac{\epsilon_1}{\mu_1}}E_1 \cos \theta_1 + \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\mu_1}}E_3 \cos \theta_3 = -\sqrt{\frac{\epsilon_2}{\mu_2}}E_2 \cos \theta_2. \quad (2.64)$$

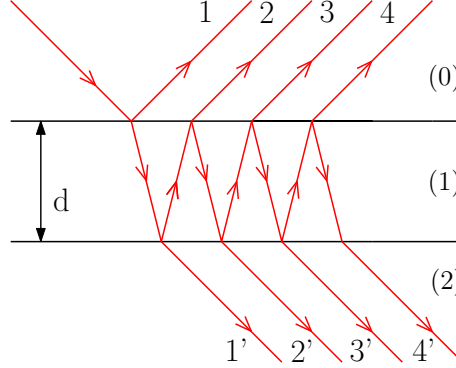
Analogickým postupem jako v předcházejícím případě a použitím vztahu $n = c\sqrt{\epsilon\mu}$, získáme známý přepis Fresnelových amplitudových koeficientů odrazivosti a propustnosti pro s -polarizovanou vlnu.

$$r_s = \frac{n_1 \cos \theta_1 - n_2 \cos \theta_2}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2}, \quad (2.65)$$

$$t_s = \frac{2n_1 \cos \theta_1}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2}. \quad (2.66)$$

2.3.3 Vícevrstvé systémy

Uvažujme tenkou vrstvu o tloušťce d a indexu lomu n_1 , která se nachází se mezi prostředím o indexu lomu n_0 a prostředím o indexu lomu n_2 , tak jako je tomu na obrázku (2.9), kde vznikají dvě rozhraní (01) a (12). Při dopadu elektromagnetické vlny na rozhraní (01) pod úhlem dopadu θ_0 dochází k částečnému odrazu, jenž popíšeme koeficientem odrazivosti $r_{s,p}^{(01)}$ a částečnému průchodu, jenž popíšeme koeficientem propustnosti $t_{s,p}^{(01)}$. Vlna procházející tenkou vrstvou prodělá změnu fáze, což se promítne do jejího fázeového členu $e^{-ik_z d}$, a dopadá na rozhraní (12), kde opět dochází k částečnému odrazu a průchodu.



Obrázek 2.9: Schématický nákres vícenásobného odrazu a průchodu pro tenkou vrstvu.

Označíme-li si první vlnu, která prochází tenkou vrstvou jako 1', můžeme její koeficient propustnosti vyjádřit jako:

$$t_{s,p}^{(01)} e^{-ik_z d} t_{s,p}^{(12)}, \quad (2.67)$$

Budeme-li aplikovat stejný postup pro vlny označené 2' a 3' (viz. 2.9), s ohledem na jejich vnitřní odrazy dostaneme následující rovnice:

$$t_{s,p}^{(01)} e^{-ik_z d} r_{s,p}^{(12)} e^{-ik_z d} r_{s,p}^{(10)} e^{-ik_z d} t_{s,p}^{(12)}, \quad (2.68)$$

$$t_{s,p}^{(01)} e^{-ik_z d} r_{s,p}^{(12)} e^{-ik_z d} r_{s,p}^{(10)} e^{-ik_z d} r_{s,p}^{(12)} e^{-ik_z d} r_{s,p}^{(10)} e^{-ik_z d} t_{s,p}^{(12)}. \quad (2.69)$$

Z předpisu vln procházejících je zřejmé, že s každým dalším odrazem přibývá člen $r_{s,p}^{(12)} e^{-ik_z d} r_{s,p}^{(10)} e^{-ik_z d}$. Výsledný koeficient propustnosti bude tedy dán sumou všech vln, které prochází tenkou vrstvou:

$$t_{s,p}^{(012)} = t_{s,p}^{(01)} e^{-ik_z d} \left\{ 1 + r_{s,p}^{(12)} r_{s,p}^{(10)} e^{-i2k_z d} + \left[r_{s,p}^{(12)} r_{s,p}^{(10)} e^{-i2k_z d} \right]^2 + \dots \right\} t_{s,p}^{(12)}, \quad (2.70)$$

kde výraz ve složené závorce představuje geometrickou řadu. Výraz v hranaté závorce je tedy kvocient, pro který platí $q < 1$ a součet takovéto řady lze určit jako $s = \frac{1}{1-q}$. Výsledný vztah pro amplitudový koeficient prošlé vlny můžeme tedy psát ve tvaru:

$$t_{s,p}^{012} = \frac{t_{s,p}^{(01)} t_{s,p}^{(12)} e^{-ik_z d}}{1 - r_{s,p}^{(12)} r_{s,p}^{(10)} e^{-i2k_z d}} = \frac{t_{s,p}^{(01)} t_{s,p}^{(12)} e^{-ik_z d}}{1 + r_{s,p}^{(01)} r_{s,p}^{(12)} e^{-i2k_z d}}. \quad (2.71)$$

Budeme-li zkoumat vlny odražené, tak z vyjádření pro vlny 1, 2 a 3 (viz. 2.9) platí:

$$r_{s,p}^{(01)}, \quad (2.72)$$

$$t_{s,p}^{(01)} e^{-ik_z d} r_{s,p}^{(12)} e^{-ik_z d} t_{s,p}^{(10)}, \quad (2.73)$$

$$t_{s,p}^{(01)} e^{-ik_z d} r_{s,p}^{(12)} e^{-ik_z d} r_{s,p}^{(10)} e^{-ik_z d} r_{s,p}^{(12)} e^{-ik_z d} t_{s,p}^{(10)}, \quad (2.74)$$

analogickým způsobem můžeme psát součet všech odražených vln předpisem:

$$r_{s,p}^{(012)} = r_{s,p}^{(01)} + \left\{ 1 + r_{s,p}^{(10)} r_{s,p}^{(12)} e^{-i2k_z d} + \left[r_{s,p}^{(10)} r_{s,p}^{(12)} e^{-i2k_z d} \right]^2 + \dots \right\} \cdot t_{s,p}^{(01)} r_{s,p}^{(12)} t_{s,p}^{(10)} e^{-i2k_z d}, \quad (2.75)$$

kde pro vyjádření celkového amplitudového koeficientu odrazivosti vlny využijeme stejných předpokladů jako u transmisního koeficientu a dostáváme rovnici ve finální podobě:

$$r_{s,p}^{012} = r_{s,p}^{01} + \frac{t_{s,p}^{(01)} r_{s,p}^{(12)} t_{s,p}^{(10)} e^{-i2k_z d}}{1 - r_{s,p}^{(10)} r_{s,p}^{(12)} e^{-i2k_z d}} = \frac{r_{s,p}^{(01)} + r_{s,p}^{(12)} e^{-i2k_z d}}{1 + r_{s,p}^{(01)} r_{s,p}^{(12)} e^{-i2k_z d}}. \quad (2.76)$$

3 Vlastnosti optických prostředí

Základní charakteristikou optického prostředí je index lomu n , jehož závislost na vlnové délce (frekvenci) je projevem disperze prostředí. Pro prostředí mohou být obecně absorbuující, takže pro přesný popis zavádíme komplexní index lomu \hat{n} , který je definován jako:

$$\hat{n} = n + i\kappa, \quad (3.1)$$

kde n představuje reálnou část komplexního indexu lomu a κ extinkční koeficient. Index lomu je spojen s veličinou komplexní permitivity prostředí $\hat{\epsilon}$:

$$\hat{\epsilon} = \epsilon' + i\epsilon''. \quad (3.2)$$

Vzhledem ke vztahu $\hat{n} = \sqrt{\hat{\epsilon}}$ mezi komplexním indexem lomu a komplexní permitivitou prostředí platí pro reálné a imaginární části následující vztahy:

$$\epsilon' = n^2 - \kappa^2, \quad (3.3)$$

$$\epsilon'' = 2n\kappa, \quad (3.4)$$

$$n = \sqrt{\frac{\sqrt{\epsilon'^2 + \epsilon''^2} + \epsilon'}{2}}, \quad (3.5)$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{\sqrt{\epsilon'^2 + \epsilon''^2} - \epsilon'}{2}}. \quad (3.6)$$

3.1 Drudeho model

Optické vlastnosti kovů v širokém spektrálním oboru mohou být popsány modelem, kde uvažujeme pohyb volných elektronů vůči fixnímu pozadí kladných jader. Pohybovou rovnici pro jednorozměrný pohyb volného elektronu můžeme psát jako:

$$F = m_e a = m_e \frac{d^2 x}{dt^2}, \quad (3.7)$$

kde F je síla, která na elektron působí a $m_e = 9,109 \times 10^{-31}$ kg je jeho hmotnost. Celkovou sílu lze tedy vyjádřit jako:

$$F = -eE - \gamma v, \quad (3.8)$$

kde první člen v rovnici představuje příspěvek vnějšího elektrického pole s harmonickou časovou závislostí $E = E_0 e^{i\omega t}$, které působí na elektron s nábojem $e = 1,602 \times 10^{-19}$ C. Druhý člen reprezentuje tlumící sílu, kde γ je konstanta tlumení a $v = \frac{dx}{dt}$ je rychlost elektronu. Jednorozměrnou pohybovou rovnici volných elektronů lze upravit do následujícího tvaru:

$$m_e \frac{d^2 x}{dt^2} + \gamma \frac{dx}{dt} = -eE_0 e^{i\omega t}. \quad (3.9)$$

Předpokládané řešení pohybové rovnice bude ve tvaru $x = x_0 e^{i\omega t}$, a pro výchylku x_0 můžeme tedy psát:

$$x_0 = \frac{eE_0}{m_e \omega^2 - i\gamma\omega}. \quad (3.10)$$

Polarizaci lze potom vyjádřit jako $P = Np$, kde N je koncentrace elektronů a $p = -ex_0$ je dipólový moment elektronu. Po upravě dostáváme:

$$P = -\frac{e^2 N}{m_e(\omega^2 - i\frac{\gamma}{m_e}\omega)} E_0. \quad (3.11)$$

Pro relativní permitivitu a její závislost na frekvenci potom platí:

$$\epsilon_r = 1 + \chi_e = 1 + \frac{P}{\epsilon_0 E}, \quad (3.12)$$

$$\epsilon_r = 1 - \frac{e^2 N}{m_e \epsilon_0} \frac{1}{\omega^2 - i\frac{\gamma}{m_e}\omega} = 1 - \frac{\omega_1^2}{\omega^2 - i\omega_2\omega}, \quad (3.13)$$

$$\epsilon_r(\omega) = 1 - \frac{\omega_1^2}{\omega^2 - i\omega_2\omega} = 1 - \frac{E_1^2}{E^2 - iEE_2}, \quad (3.14)$$

kde $E = \hbar\omega$ je energie fotonu, ω_1 je plasmová frekvence a ω_2 je frekvence tlumení, pro které platí:

$$\omega_1 = \sqrt{\frac{e^2 N}{m_e \epsilon_0}}, \quad (3.15)$$

$$\omega_2 = \frac{\gamma}{m_e}. \quad (3.16)$$

Rovnice (3.14) je známa jako Drudeho funkce a její platnost je omezená jen na spektrální obory, kde nedochází k mezipásovým přechodům.

3.2 Lorentzův oscilátor

Za předpokladu, že jádro atomu má mnohem větší hmotnost než elektron, lze jádro považovat za nehybné a elektron je k jádru vázán silou, která je typická pro těleso zavěšené na pružině. Jednorozměrná pohybová rovnice takového elektronu (3.7) zahrnuje celkovou sílu, která na elektron působí:

$$F = -eE - \gamma v - \kappa x, \quad (3.17)$$

kde se první dva členy shodují s rovnicí (3.8), ale přibývá třetí člen, který představuje přitažlivou sílu jádra. Síla je úměrná vychýlce x s konstantou $\kappa = m_e \omega_0^2$, kde ω_0 je rezonanční frekvence. Přepíšeme-li rovnici (3.17) do tvaru:

$$m_e \frac{d^2 x}{dt^2} + \gamma \frac{dx}{dt} + m_e \omega_0^2 x = -eE_0 e^{i\omega t}, \quad (3.18)$$

můžeme pro výchylku x_0 z očekávaného řešení rovnice $x = x_0 e^{i\omega t}$ psát:

$$x_0 = \frac{-eE_0}{m_e(\omega_0^2 - \omega^2) - i\gamma\omega}. \quad (3.19)$$

Polarizaci, pro kterou platí $P = Np$, kde $p = -ex_0$, lze vyjádřit rovnicí:

$$P = \frac{e^2 N}{m_e(\omega_0^2 - \omega^2 + i\frac{\gamma}{m_e}\omega)} E_0, \quad (3.20)$$

S využitím vztahu (3.12) můžeme vyjádřit elektrickou susceptibilitu χ_e :

$$\chi_e(\omega) = \frac{A}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\gamma_0\omega} = \frac{A_0}{E_{r0}^2 - E^2 + i\Gamma_0 E}, \quad (3.21)$$

kde ω_0 je rezonanční frekvence oscilátoru, pro kterou platí $E_{r0} = \hbar\omega_0$, $\gamma_0 = \frac{\gamma}{m_e}$ je konstanta tlumení, respektive $\Gamma_0 = \hbar\gamma_0$ představuje tlumení oscilátoru, $A = \frac{Ne^2}{\epsilon_0 m_e}$ je amplituda oscilátoru a $A_0 = \hbar^2 A$.

Speciálním případem Lorentzova tlumeného harmonického oscilátoru pro $E_{r0} = 0$, $E_1^2 = A$ a $E_2 = \Gamma_0$ je Drudeho funkce:

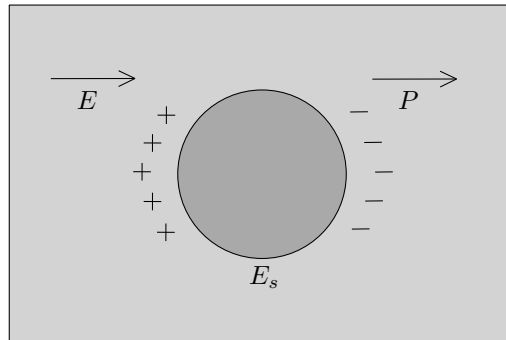
$$\chi_e(\omega) = -\frac{E_1^2}{E^2 - iEE_2}. \quad (3.22)$$

Další speciální případ nastává pro $\Gamma_0 = 0$, což je podmínka, která platí jen v oblasti nulových absorpcí. Dosazením do rovnice (3.21) dostáváme Sellmeirovu funkci:

$$\chi_e(\omega) = -\frac{A_0}{E_0^2 - E^2} = \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - B^2}. \quad (3.23)$$

3.3 Efektivní prostředí

Aproximaci efektivním prostředím lze využít v případech, kdy chceme znát permitivitu nehomogenních nanostruktur, mezi které patří například nanoporézní materiály, periodické nanomřížky nebo drsný povrch. Tento přístup je však použitelný jen pokud vlnová délka elektromagnetického záření interagující s daným prostředím je mnohem větší než velikost nehomogenit prostředí. Uvažujme případ podle obrázku (3.1).



Obrázek 3.1: Koule v homogenním elektrickém poli.

Na kouli působí homogenní elektrické pole, které způsobí polarizaci koule. Velikost lokálního elektrického E_l pole získáme odečtením pole vytvářeného koulí $E_s = -\frac{P}{3\epsilon_0}$ od vnějšího elektrického pole E :

$$E_l = E - E_s = E + \frac{P}{3\epsilon_0}. \quad (3.24)$$

Po úpravě rovnice (3.24) s využitím vedlejší Maxwellovy rovnice (2.5) lze dojít ke vztahu pro lokální elektrické pole:

$$E_l = E + \frac{P}{3\epsilon_0} = \frac{\epsilon_r + 2}{3}E, \quad (3.25)$$

kde při vyjádření pro polarizaci $P = Np = N\epsilon_0\alpha E_l = \epsilon_0(\epsilon_r - 1)E$, následném dosazení (3.25) a úpravě docházíme k rovnici:

$$\frac{N\alpha}{3} = \frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2}, \quad (3.26)$$

která se nazývá Clausiusova-Mossottiho rovnice. Tato rovnice udává přímou souvislost mezi mikroskopickou veličinou polarizovatelnost α a makroskopickou veličinou permitivita ϵ_r .

Obecnou rovnici pro dva materiály o permitivitách ϵ_a , ϵ_b a objemovým zastoupením f , $1 - f$, která se nacházejí v prostředí s permitivitou ϵ lze vyjádřit jako:

$$\frac{\epsilon_{ef} - \epsilon}{\epsilon_{ef} + 2\epsilon} = f \frac{\epsilon_a - \epsilon}{\epsilon_a + 2\epsilon} + (1 - f) \frac{\epsilon_b - \epsilon}{\epsilon_b + 2\epsilon}. \quad (3.27)$$

V této práci uvažujeme Bruggemanovu aproximaci efektivního prostředí, kde permitivita ϵ prostředí je rovna permitivitě efektivního prostředí ϵ_{ef} , $\epsilon = \epsilon_{ef}$. Při dosazení do (3.27) dostáváme rovnici:

$$f \frac{\epsilon_a - \epsilon}{\epsilon_a + 2\epsilon} + (1 - f) \frac{\epsilon_b - \epsilon}{\epsilon_b + 2\epsilon} = 0, \quad (3.28)$$

která vede po úpravě na kvadratickou rovnici. Správnost řešení lze ověřit pro objemová zastoupení $f = 0$ a $f = 1$ daných materiálů.

4 Povrchová plazmonová rezonance

Jev povrchové plazmonové rezonance můžeme chápat jako rezonanční efekt vázaný na povrchové elektromagnetické vlny spojené s oscilacemi volných elektronů na rozhraní kovu a dielektrika [9]. Tyto povrchové elektromagnetické vlny jsou silně vázány na rozhraní a jejich pole dosahuje maximální hodnoty na povrchu, kde se vzdalováním od rozhraní exponenciálně klesá. Tato část práce bude věnována možnostem a podmínkám excitace povrchových plazmonů.

4.1 Disperzní relace - povrchový plazmon

Uvažujme jednoduché rozhraní kovu a dielektrika jako na obrázku (4.1), na které dopadá p -polarizovaná vlna. Složky pole vlny v dielektriku pro $z > 0$ lze vyjádřit jako:

$$\vec{E}_1 = (E_{x1}, 0, E_{z1})e^{i[k_{1x}x + k_{1z}z - \omega t]}, \quad (4.1)$$

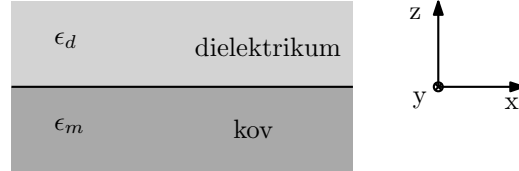
$$\vec{H}_1 = (0, H_{y1}, 0)e^{i[k_{1x}x + k_{1z}z - \omega t]}. \quad (4.2)$$

Složky pole vlny v kovu pro $z < 0$ lze vyjádřit jako:

$$\vec{E}_2 = (E_{x2}, 0, E_{z2})e^{i[k_{2x}x - k_{2z}z - \omega t]}, \quad (4.3)$$

$$\vec{H}_2 = (0, H_{y2}, 0)e^{i[k_{2x}x - k_{2z}z - \omega t]}. \quad (4.4)$$

Rovnice (4.1-4.4) musí vyhovovat Maxwellovým rovnicím a splňovat hraniční podmínky.



Obrázek 4.1: Schematický náčrt rozhraní dielektrika a kovu.

Vydeme-li z Maxwellovy rovnice (2.4), kterou lze přepsat do tvaru:

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}, \quad (4.5)$$

můžeme obecně pro složky pole vlny psát:

$$\frac{\partial H_{yi}}{\partial z} = \epsilon_i E_{xi} \frac{\omega}{c}, \quad (4.6)$$

kde pro složky v dielektriku a kovu dostáváme:

$$+ k_{z1} H_{y1} = -\frac{\omega}{c} \epsilon_d E_{x1}, \quad (4.7)$$

$$+ k_{z2} H_{y2} = +\frac{\omega}{c} \epsilon_m E_{x2}, \quad (4.8)$$

Rovnice (4.7) a (4.8) lze upravit využitím hraničních podmínek $E_{x1} = E_{x2}$, $H_{y1} = H_{y2}$ do tvaru:

$$\frac{k_{z1}}{\epsilon_d} H_{y1} + \frac{k_{z2}}{\epsilon_m} H_{y2} = 0, \quad (4.9)$$

kde abychom získali řešení, položíme determinant D soustavy rovnic roven nule:

$$D = \frac{k_{z1}}{\epsilon_d} + \frac{k_{z2}}{\epsilon_m} = 0, \quad (4.10)$$

z čehož získáváme disperzní relace povrchových plazmonů v jednoduché sestavě na obrázku (4.1). Další úpravou vztahu (4.6), s využitím Maxwellových rovnic (2.10) a (4.5), lze dojít k vyjádření:

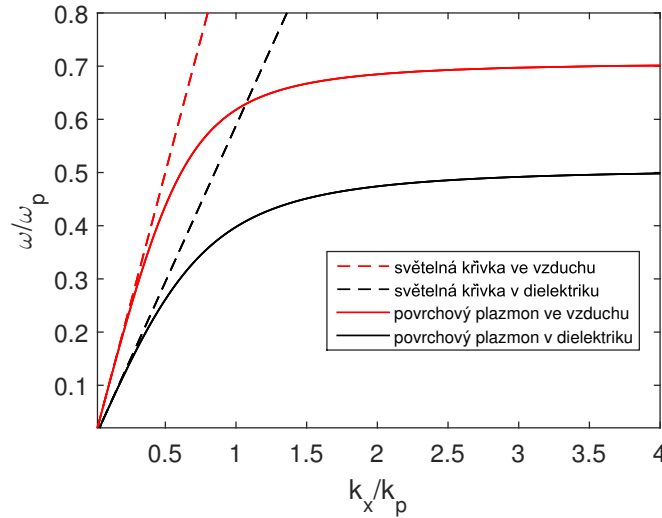
$$k_x^2 + k_{zi}^2 = \epsilon_i \left(\frac{\omega}{c} \right)^2, \quad (4.11)$$

kde při dosazení do rovnice (4.10) docházíme ke známé formě disperzní rovnice povrchových plazmonů:

$$k_x = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\epsilon_d \epsilon_m}{\epsilon_d + \epsilon_m}}. \quad (4.12)$$

4.2 Vybuzení povrchových plazmonů

Z disperzních relací povrchového plazmonu vyplývá, že při dopadu p -polarizované vlny na samotné rozhraní nelze povrchový plazmon vybudit, což je zřejmé z obrázku (4.2).



Obrázek 4.2: Disperzní relace povrchového plazmonu na rozhraní kovu a vzduchu (červená) a kovu a dielektrika (černá).

Můžeme vidět, že světelná křivka ve vzduchu se neprotíná s křivkou povrchového plazmonu a není tedy splněna fázová podmínka:

$$k_x = k_{sp}. \quad (4.13)$$

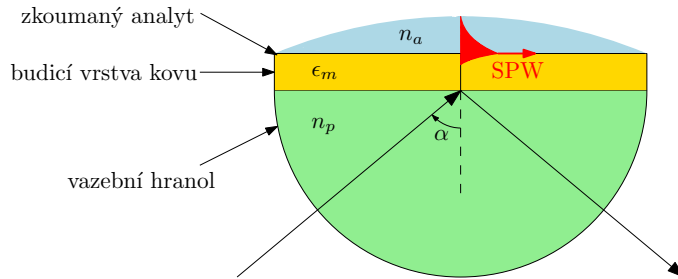
Podmínka však může být splněna pro systém tří vrstev tvořený dielektrikem, tenkou vrstvou kovu a druhým dielektrikem s odlišnou permitivitou, což je zřejmé z obrázku (4.2), kde lze pozorovat průsečík mezi světelnou křivkou v dielektriku a křivkou povrchového plazmonu [10], který značí splnění fázové podmínky (4.13).

4.2.1 Optický hranol

Nejznámější konfigurací, ve které lze vybudit povrchové plazmony, je Kretschmannova konfigurace, kterou můžeme vidět na obrázku (4.3). Při dopadu p -polarizované vlny na rozhraní kovu a vazebního hranolu pod úhlem větším než je úhel kritický, kde $\alpha > \theta_c$, dochází k zeslabenému úplnému odrazu a excitaci povrchového plazmonu na rozhraní kov/analyt evanescentní vlnou, která prochází tenkou vrstvou kovu. Dochází tedy ke splnění fázové podmínky (4.13), kterou lze pro tento případ vyjádřit jako:

$$n_1(\omega) \sin \alpha = Re \left[\sqrt{\frac{\epsilon_m(\omega)\epsilon_d(\omega)}{\epsilon_m(\omega) + \epsilon_d(\omega)}} \right], \quad (4.14)$$

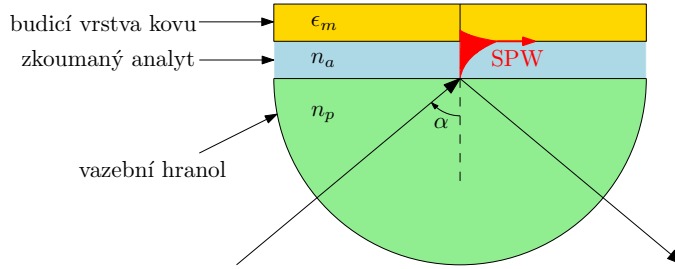
kde $n_1(\omega)$ je spektrálně závislý index lomu hranolu, α je úhel dopadu, $\epsilon_m(\omega)$ a $\epsilon_d(\omega)$ jsou spektrálně závislé permitivity kovu a dielektrika. Re představuje reálnou část.



Obrázek 4.3: Schematický náčrt Kretschmannovy konfigurace.

Jev povrchové plazmonové rezonance v této konfiguraci lze sledovat například při určitém úhlu dopadu ve spektrálním měření poměru odrazivosti R_p/R_s , kde se projeví jako pokles odrazivosti na určité vlnové délce, kterou nazýváme rezonanční vlnová délka λ_r . Vzhledem k tomu, že dochází ke splnění fázové podmínky (4.14) pro více úhlů dopadu, lze jev povrchové plazmonové rezonance také pozorovat v závislosti odrazivosti na úhlu dopadu, kde na vlnové délce zdroje dochází k poklesu odrazivosti pro daný rezonanční úhel. Při rozšíření konfigurace o dvojloemný krystal lze také provádět fázové měření, kdy lze detekovat excitaci povrchových plazmonů a na základě zpracování interferogramů lze určit fázový posuv mez p a s polarizovanými vlnami.

Mezi další známé konfigurace, ve kterých lze vybudit povrchové plazmony, patří Ottova konfigurace [11]. Způsob excitace je analogický jako v předchozím případě a konfigurace se od Kretschmannovy liší pouze v konstrukci. Namísto nanesení kovové vrstvy na vazební hranol je sestava tvořená tenkou mezerou. Schématický náčrt Ottovy konfigurace je na obrázku (4.4).



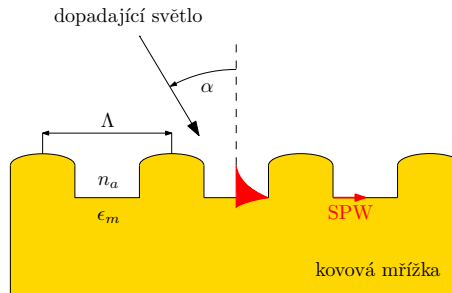
Obrázek 4.4: Schématický náčrt Ottovy konfigurace.

4.2.2 Optická mřížka

Vybuzení povrchových plazmonů je možné i na optické mřížce. Pro jednoduchý jednodimenzi-onální případ jako na obrázku (4.5) dojde k excitaci povrchových plazmonů při splnění fázové podmínky:

$$k_{sp} = k \sin \alpha \pm m \frac{2\pi}{\Lambda}, \quad (4.15)$$

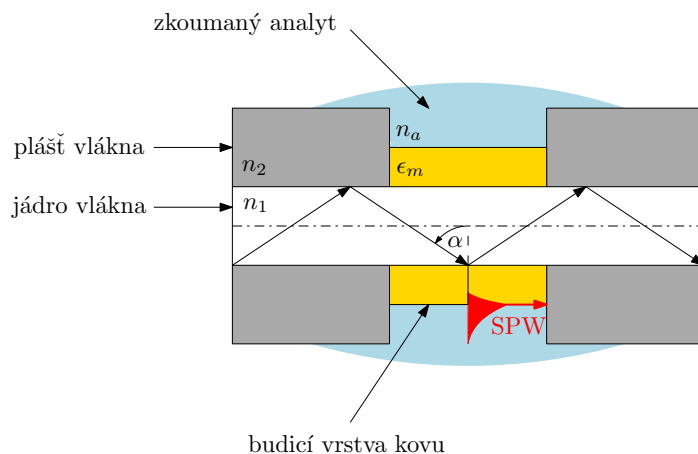
kde $\frac{2\pi}{\Lambda}$ je reciproký vektor mřížky, Λ je mřížková konstanta a $m = (1, 2, 3...)$. Detekci vzniku po-vrchového plazmonu je možné provést měřením odrazivosti, kde stejně jako při excitaci hranolem dochází k poklesu odrazivosti v okolí rezonanční vlnové délky λ_r .



Obrázek 4.5: Schématický náčrt buzení povrchových plazmonů na optické mřížce.

4.2.3 Optická vlákna

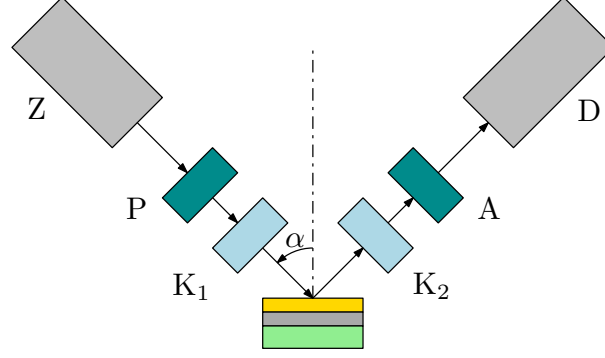
Excitaci povrchových plazmonů je možné uskutečnit v planárních vlnovodech nebo optických vláknech [12, 13], jelikož se jimi světlo šíří úplnými odrazy. Schématický náčrtek jednoduché konstrukce optického vlákna můžeme vidět na obrázku (4.6). Jedná se o nejjednodušší konstrukci, kde v určité části vlákna je plášť nahrazen tenkou kovovou vrstvou. K vybuzení povrchového plazmonu opět dochází při splnění fázové podmínky (4.13).



Obrázek 4.6: Schématický náčrtek konstrukce optického vlákna s SPR strukturou.

5 Elipsometrie a charakterizace prostředí

K analýze plazmonické struktury bylo využito spektroskopické elipsometrie. Tato optická metoda je vhodná k charakterizaci systému tenkých vrstev, jelikož na základě změn polarizace vlny, která interaguje s měřeným vzorkem, dostáváme informace o amplitudě i fázi, ze kterých lze určit optické konstanty a tloušťky jednotlivých vrstev. Schématický náčrt elipsometrické sestavy je znázorněn na obrázku (5.1).



Obrázek 5.1: Schématický náčrt elipsometru. Světelná vlna ze zdroje (Z), jejíž polarizační stav je určen polarizátorem (P) a kompenzátorem (K_1) dopadá na vzorek pod úhlem α . Na základě interakce světelné vlny se vzorkem se mění její polarizační stav, který je poté určen po průchodu analyzátozem (A) a kompenzátorem (K_2) na základě odezvy zachycené na detektoru (D).

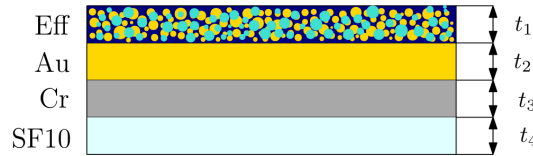
Parametry popisující změnu polarizace vlny, které nesou informaci o amplitudě a fázi, se nazývají elipsometrické úhly Ψ a Δ , které vystupují v poměru reflexních koeficientů p - a s -polarizované vlny:

$$\rho = \frac{r_p}{r_s} = \tan \psi e^{i\Delta}, \quad (5.1)$$

kde $\tan \psi$ představuje amplitudový člen a $\Delta = \delta_p - \delta_s$ je rozdíl fází mezi složkami p - a s -polarizované vlny.

5.1 Elipsometrické měření

V rámci této práce byla provedena elipsometrická měření substrátu SF10, hranolu SF10 a multivrstvy SF10/Cr/Au pro úhly dopadu $40^\circ - 70^\circ$ s krokem 5° ve viditelné a blízké infračervené oblasti, která slouží k určení optických konstant a tlouštěk plazmonické struktury schématicky znázorněné na obrázku (5.2).



Obrázek 5.2: Schématický náčrt čtyř vrstev plazmonické struktury, která je tvořena substrátem SF10 o tloušťce $t_4 = 1$ mm, adhezí vrstvou chromu, budící vrstvy zlata a efektivním prostředím, které simuluje drsnost povrchu.

5.2 Fitování naměřených dat

Fitování naměřených dat můžeme rozumět jako optimalizaci parametrů funkce, kterou aproximujeme. Aproximovaná funkce $\rho = \rho(\lambda, a_1, \dots, a_n)$ může být obecně funkcí několika parametrů. Cílem fitování je minimalizovat rozdíl mezi naměřenými daty a modelem, který je tvořen teoretickou závislostí měřené veličiny. Rozdíl mezi naměřenými daty a teoretickými hodnotami můžeme vyjádřit jako:

$$\chi^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{[\rho(\lambda, a_1, \dots, a_n) - \rho_i]^2}{\sigma_i^2}, \quad (5.2)$$

kde parametr σ představuje míru kvality optimalizace parametrů aproximované funkce. K minimalizaci $\min(\chi^2)$ bylo využito funkce *fminsearch* v softwaru MATLAB, která je založena na Nelderově-Meadově algoritmu [14], kde se jedná o robustní simplexovou metodu. K modelování poměru reflexních koeficientů p - a s -polarizovaného světla, který je značen jako ρ , bylo využito rekurentních Fresnelových vztahů:

$$r_{s,p}^{345} = \frac{r_{s,p}^{(34)} + r_{s,p}^{(45)} e^{-i2k_z t_3}}{1 + r_{s,p}^{(34)} r_{s,p}^{(45)} e^{-i2k_z t_3}}, \quad (5.3)$$

$$r_{s,p}^{2345} = \frac{r_{s,p}^{(23)} + r_{s,p}^{(345)} e^{-i2k_z t_2}}{1 + r_{s,p}^{(23)} r_{s,p}^{(345)} e^{-i2k_z t_2}}, \quad (5.4)$$

$$r_{s,p}^{12345} = \frac{r_{s,p}^{(12)} + r_{s,p}^{(2345)} e^{-i2k_z t_1}}{1 + r_{s,p}^{(12)} r_{s,p}^{(2345)} e^{-i2k_z t_1}}, \quad (5.5)$$

kde model tvoří systém pěti vrstev jako na obrázku (5.2), který je rozšířen o prostředí, ze kterého světlo na plazmonickou strukturu dopadá.

5.3 Charakterizace jednotlivých prostředí

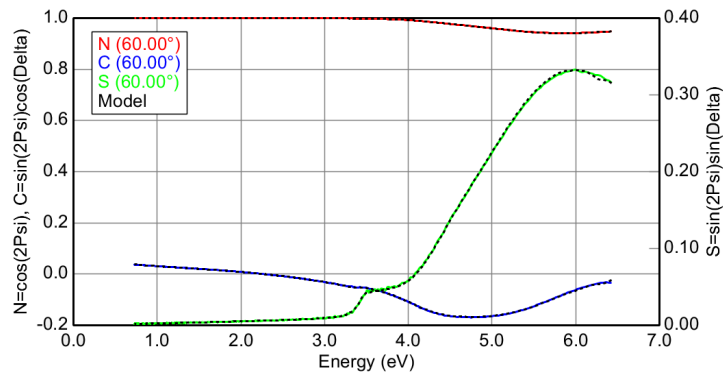
Tato část práce je věnována zpracování naměřených dat a určení optických konstant a tloušťek jednotlivých vrstev plazmonické struktury. Zpracování naměřených dat bylo uskutečněno v softwaru MATLAB a COMPLETEEASE.

5.3.1 Substrát - sklo SF10

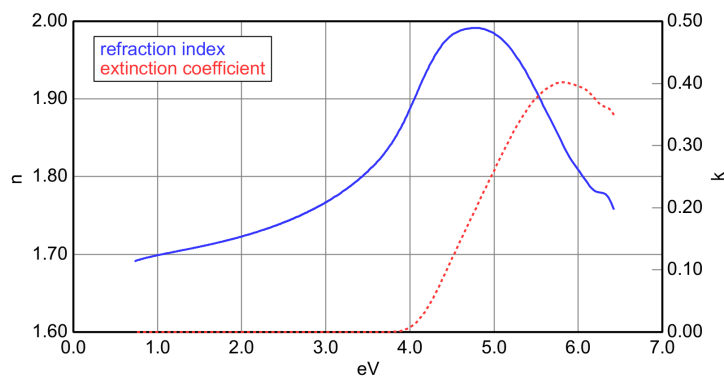
Zpracování měření a vytvoření modelu pro substrát SF10 bylo provedeno v softwaru COMPLETEEASE. K modelování optických konstant substrátu SF10 byl využit matematický B-spline model:

$$\varepsilon_{1, \text{BS}}(E) = \varepsilon_1(\infty) + \sum_{i=1}^n c_i \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\omega B_i^k(\omega)}{\omega^2 - E^2} d\omega, \quad (5.6)$$

který splňuje Kramers-Kronigovy relace. Model uvažuje tloušťku udávanou výrobcem $t_4 = 1$ mm a trojnásobný zpětný odraz uvnitř substrátu. Ukázka zpracování naměřených dat je na obrázku (5.3), kde jsou fitovány prvky NCS matice pro úhel dopadu 60° . Na obrázku (5.4) jsou vykresleny odpovídající optické konstanty vzorku.



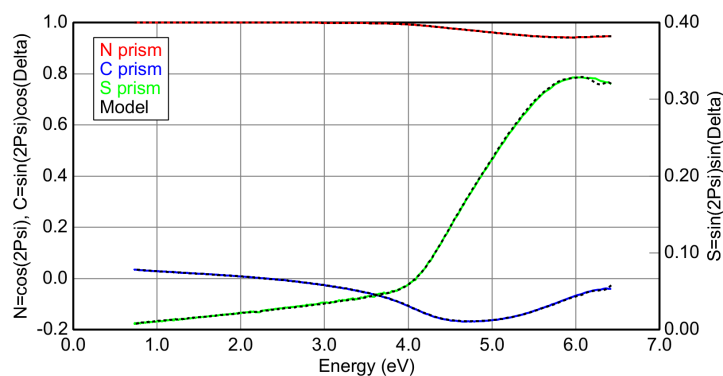
Obrázek 5.3: Prvky NCS matice substrátu SF10 pro úhel dopadu 60° .



Obrázek 5.4: Určené optické konstanty substrátu SF10.

5.3.2 Hranol - sklo SF10

K ověření správnosti modelu pro substrát bylo využito stejného modelu také pro hranol, který byl měřen na externí odraz pod úhlem 60° . Výsledek lze vidět na obrázku (5.5), kde je patrné, že je model v dobrém souhlasu s naměřenými daty.



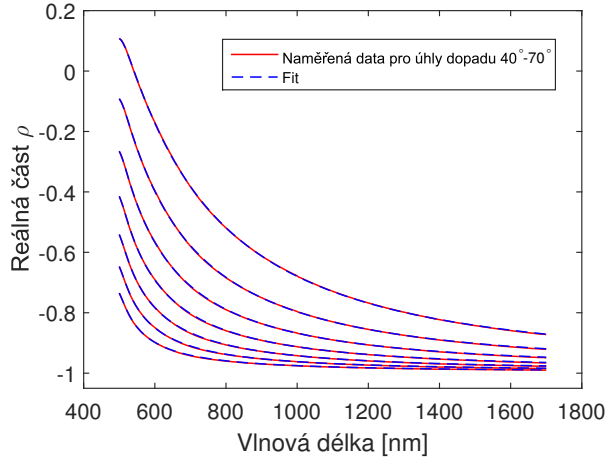
Obrázek 5.5: Prvky NCS matice hranolu SF10 pro úhel dopadu 60° .

5.3.3 Vrstva zlata

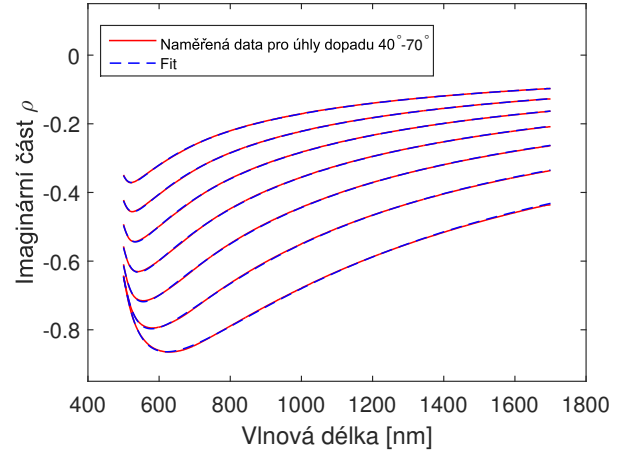
K vyjádření optických konstant zlata bylo využito Drudeho-Lorentzova modelu, který lze vyjádřit v následujícím tvaru jako [15, 16]:

$$\varepsilon_{\text{Au}}(\lambda) = \varepsilon_{\infty} - \frac{1}{\lambda_p^2(1/\lambda^2 + i/\gamma_p\lambda)} - \sum_{j=1}^2 \frac{A_j}{\lambda_j^2(1/\lambda^2 - 1/\lambda_j^2) + i\lambda_j^2/\gamma_j\lambda}. \quad (5.7)$$

Zpracování elipsometrického měření k určení tloušťky a parametrů Drudeho-Lorentzova modelu pro zlato bylo provedeno v softwaru MATLAB. Naměřené spektrální závislosti reálné a imaginární části ρ lze vidět na obrázcích (5.6) a (5.7).



Obrázek 5.6: Reálná část ρ v závislosti na vlnové délce, kde červená plná čára reprezentuje naměřená data a modrá přerušovaná čára reprezentuje fit.



Obrázek 5.7: Imaginární ρ v závislosti na vlnové délce, kde červená plná čára reprezentuje naměřená data a modrá přerušovaná čára reprezentuje fit.

Z obrázků (5.6), (5.7) je patrné, že model je v dobrém souhlasu s naměřenými daty. Mezi určené parametry patří osm parametrů Drudeho-Lorentzova modelu (λ_p , γ_p , A_1 , λ_1 , γ_1 , A_2 , λ_2 , γ_2), tloušťka zlaté vrstvy t_{au} , tloušťka efektivního prostředí t_{ef} a zastoupení zlata v efektivním prostředí f . Výsledné parametry Drudeho-Lorentzova modelu získané z fitování experimentálních dat jsou zapsány v tabulce (5.1).

Konstanta	Hodnota	Jednotka
ϵ_{∞}	1	l.j.
λ_p	135,71	nm
γ_p	13819,63	nm
A_1	7,11	l.j.
λ_1	294,24	nm
γ_1	1134,20	nm
A_2	0,06	l.j.
λ_2	487,20	nm
γ_2	7856,94	nm

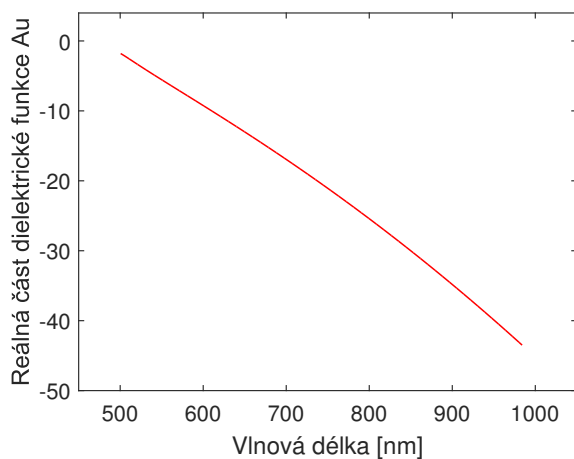
Tabulka 5.1: Parametry Drudeho-Lorentzova modelu zlata.

Parametry tloušťky zlata udávané výrobcem, tloušťky zlata určené z experimentálních dat, tloušťky efektivního prostředí a zastoupení zlata v efektivním prostředí jsou zapsány v tabulce (5.2).

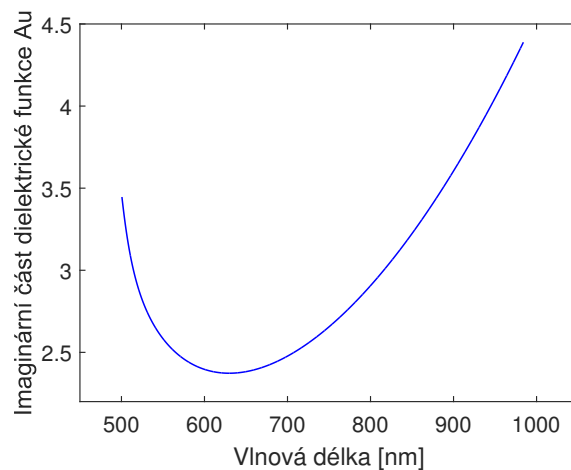
Parametr	Hodnota	Jednotka
t_{au} - výrobce	44,8	nm
t_{au}	44,2	nm
f	0,3	l.j.
t_{ef}	1,8	nm

Tabulka 5.2: Parametry tlouštěk zlata a efektivního prostředí.

Reálná a imaginární část dielektrické funkce zlata určená ze získaných parametrů Drudeho-Lorentzova modelu je zobrazena na obrázcích (5.8) a (5.9), kde z důvodu zaměření na spektrální oblast [500, 1000] nm v experimentální části práce, budou zobrazeny veškeré optické konstanty jednotlivých prostředí ve stejném rozsahu.



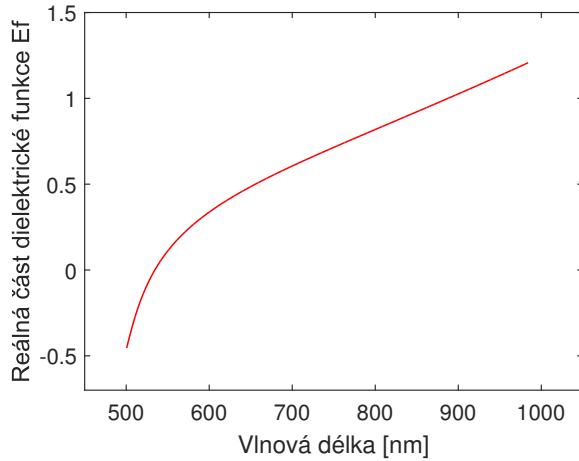
Obrázek 5.8: Reálná část komplexní dielektrické funkce zlata v závislosti na vlnové délce.



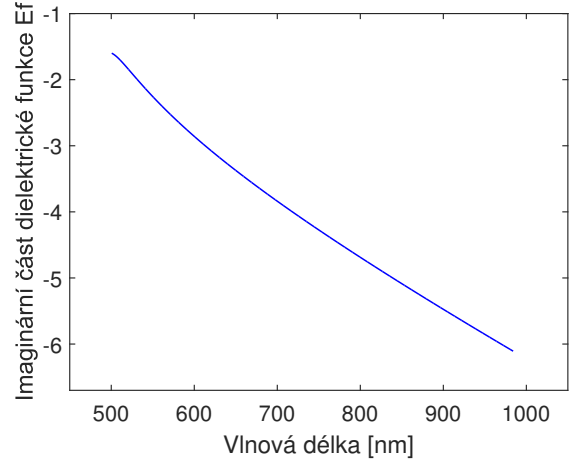
Obrázek 5.9: Imaginární část komplexní dielektrické funkce zlata v závislosti na vlnové délce.

5.3.4 Vrstva efektivního prostředí

K simulaci drsnosti povrchu zlaté vrstvy bylo využito Bruggemanovy aproximace efektivním prostředím [17]. Optické konstanty efektivního prostředí jsou určeny z kořenu kvadratické rovnice (3.28). Výsledné parametry tloušťky efektivního prostředí t_{ef} a objemového zastoupení zlata f určené z fitování experimentálních dat jsou vypsány v tabulce (5.2). Reálná a imaginární část dielektrické funkce efektivního prostředí je zobrazena na obrázcích (5.10) a (5.11).



Obrázek 5.10: Reálná část komplexní dielektrické funkce efektivního prostředí v závislosti na vlnové délce.



Obrázek 5.11: Imaginární část komplexní dielektrické funkce efektivního prostředí v závislosti na vlnové délce.

5.3.5 Adhezní vrstva chromu

Jelikož se jedná o velice tenkou adhezní vrstvu, jejíž výrobcem udávaná tloušťka je $t_{Cr} = 2$ nm, tak provedené elipsometrické měření nebylo na danou vrstvu příliš citlivé, a proto nebylo možné vrstvu chromu charakterizovat. K vyjádření optických konstant adhezní vrstvy chromu bylo využito Drudeho-Lorentzova modelu ve tvaru [18]:

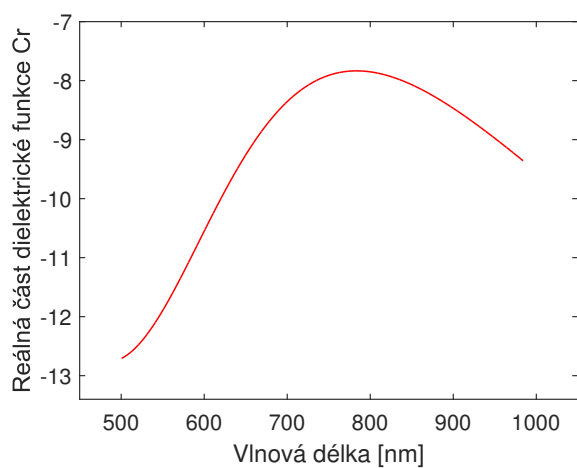
$$\varepsilon_{Cr}(\lambda) = \varepsilon_{\infty} - \frac{1}{\lambda_p^2(1/\lambda^2 + i/\gamma_p\lambda)} - \frac{A_1}{\lambda_1^2(1/\lambda^2 - 1/\lambda_1^2) + i\lambda_1^2/\gamma_1\lambda}. \quad (5.8)$$

Parametry Drudeho-Lorentzova modelu pro chrom jsou vypsány v tabulce (5.3).

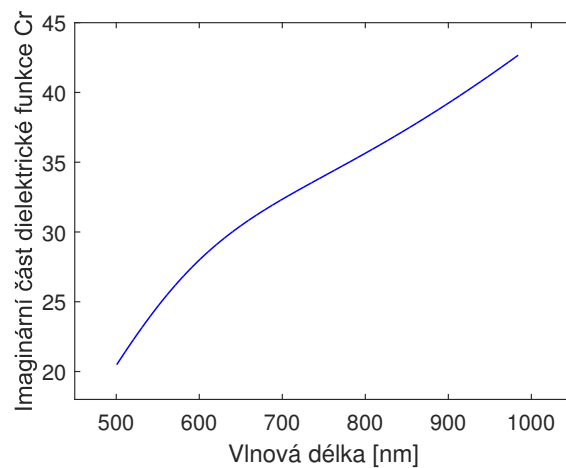
Konstanta	Hodnota	Jednotka
ϵ_{∞}	2,78	l.j.
λ_p	118,41	nm
γ_p	731,11	nm
A_1	13,29	l.j.
λ_1	565,71	nm
γ_1	628,60	nm

Tabulka 5.3: Parametry Drudeho-Lorentzova modelu chromu.

Reálná a imaginární část dielektrické funkce chromu je zobrazena na obrázcích (5.12) a (5.13).



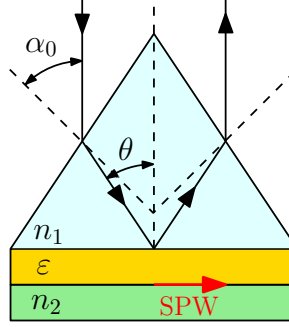
Obrázek 5.12: Reálná část komplexní dielektrické funkce chromu v závislosti na vlnové délce.



Obrázek 5.13: Imaginární část komplexní dielektrické funkce chromu v závislosti na vlnové délce.

6 Teoretický model

Tato část práce je věnována popisu teoretického modelu SPR sestavy [19], který je používán k výpočtu poměru odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$, fázového posuvu $\Delta(\lambda)$ a derivace fázového posuvu $d\Delta(\lambda)/d\lambda$. Model uvažuje SPR sestavu s vazebním rovnostranným hranolem v Kretschmannově uspořádání, která je schématicky nakreslená na obrázku (6.1).



Obrázek 6.1: Schématický náčrt Kretschmannovy konfigurace s rovnostranným hranolem.

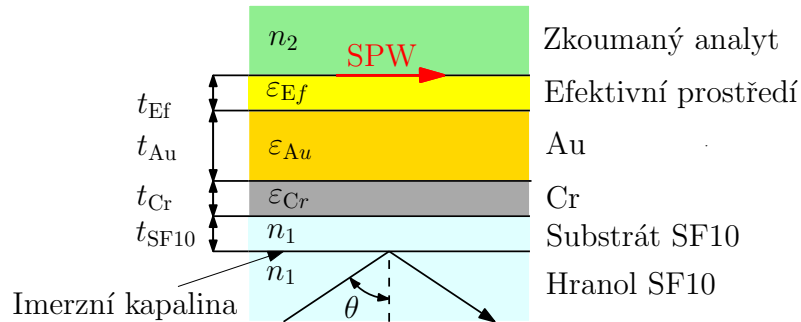
K výpočtu úhlu dopadu na SPR sestavu θ lze využít znalosti úhlu dopadu na hranol α_0 , kde na základě Snellova zákona lomu a geometrie rovnostranného hranolu lze odvodit vztah [20]:

$$\theta = 60^\circ - \sin^{-1} \left[\frac{n_0(\lambda)}{n_1(\lambda)} \sin \alpha_0 \right], \quad (6.1)$$

kde $n_1(\lambda)$ je spektrálně závislý index lomu hranolu a $n_0(\lambda)$ je spektrálně závislý index lomu vzduchu.

6.1 Plazmonická struktura

Plazmonická struktura se skládá ze systému sedmi vrstev, jejíž schématický náčrt lze vidět na obrázku (6.2). V modelu vystupují tloušťky zlata $t_{Au} = 44.2$ nm a efektivního prostředí $t_{Ef} = 1.8$ nm určené z elipsometrického měření, a tloušťky $t_{Cr} = 2$ nm a $t_{SF10} = 1$ mm převzaty od výrobce.



Obrázek 6.2: Schématický náčrt plazmonické struktury.

6.2 Optické vlastnosti prostředí

V této podkapitole práce jsou uvedeny rovnice a parametry, které byly využity k výpočtu optických konstant analytů vzduch, voda a imerzní kapaliny.

6.2.1 Vzduch

K určení disperze vzduchu při teplotě 15°C a tlaku 101.3 kPa bylo využito rovnice [21]:

$$n(\lambda, T_0, p_0) = n_0 + \frac{A_1 \lambda^2}{B_1 \lambda^2 - 1} + \frac{A_2 \lambda^2}{B_2 \lambda^2 - 1}, \quad (6.2)$$

kde index lomu vzduchu $n(\lambda, T, p)$ při teplotě T a tlaku p lze určit jako:

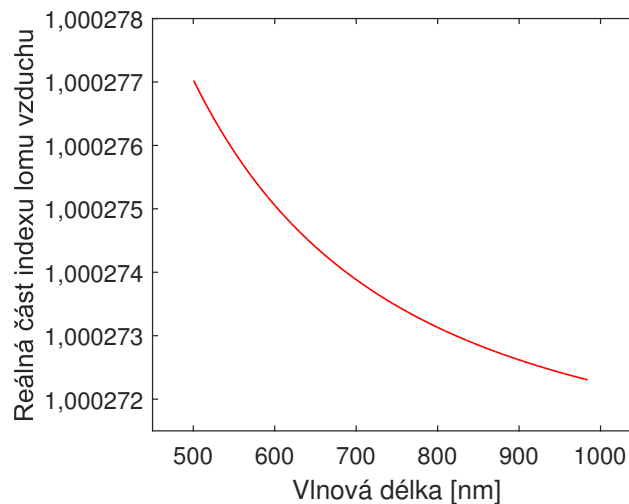
$$n(\lambda, T, p) = 1 + \frac{n(\lambda, T_0, p_0) - 1}{1 + \alpha(T - T_0)} \frac{p}{p_0}, \quad (6.3)$$

kde λ je vlnová délka v μm , A_i , B_i jsou koeficienty a α je koeficient teplotní roztažnosti vzduchu. Jejich hodnoty jsou uvedeny v tabulce (6.1).

Koeficient	Hodnota	Jednotka
A_1	$2,950 \times 10^{-2}$	μm^{-2}
A_2	$2,554 \times 10^{-4}$	μm^{-2}
B_1	$1,460 \times 10^2$	μm^{-2}
B_2	$0,410 \times 10^2$	μm^{-2}
n_0	1,000064328	<i>l.j.</i>
α	$3,4785 \times 10^{-3}$	K^{-1}
T	22,00	$^{\circ}\text{C}$
p	101,30	kPa

Tabulka 6.1: Koeficienty pro výpočet indexu lomu vzduchu.

Závislost indexu lomu vzduchu na vlnové délce je zobrazena na obrázku (6.3).



Obrázek 6.3: Závislost indexu lomu vzduchu na vlnové délce.

6.2.2 Voda

K určení disperze vody bylo využito Sellmeierovy formule ve tvaru [22]:

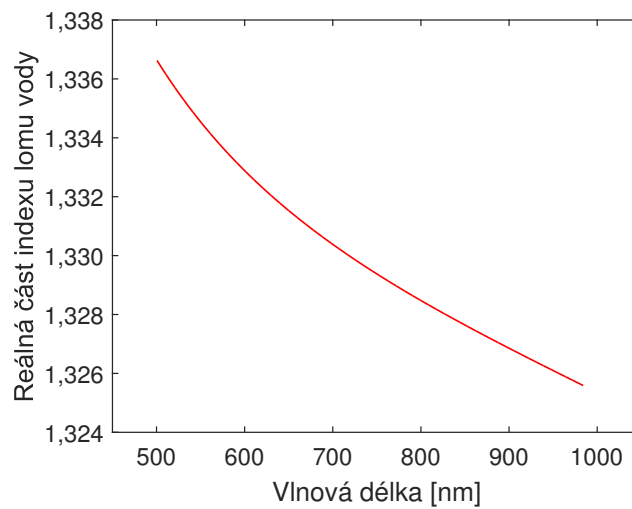
$$n^2(\lambda) = 1 + \sum_{i=1}^4 \frac{A_i \lambda^2}{\lambda^2 - B_i}, \quad (6.4)$$

kde λ je vlnová délka v μm a A_i , B_i jsou Sellmeierovy koeficienty. Jejich hodnoty při teplotě 22°C jsou uvedeny v tabulce (6.2).

<i>Koeficient</i>	<i>Hodnota</i>	<i>Jednotka</i>
A_1	$5,667 \times 10^{-1}$	<i>l.j.</i>
A_2	$1,732 \times 10^{-1}$	<i>l.j.</i>
A_3	$2,096 \times 10^{-2}$	<i>l.j.</i>
A_4	$1,125 \times 10^{-1}$	<i>l.j.</i>
B_1	$5,084 \times 10^{-3}$	μm^2
B_2	$1,818 \times 10^{-2}$	μm^2
B_3	$2,625 \times 10^{-2}$	μm^2
B_4	10,738	μm^2

Tabulka 6.2: Koeficienty Sellmeierovy formule pro vodu.

Závislost indexu lomu vody na vlnové délce je zobrazena na obrázku (6.4).



Obrázek 6.4: Závislost indexu lomu vody na vlnové délce.

6.2.3 Imerzní kapalina

K určení disperze imerzní kapaliny byla použita Cauchyho formule ve tvaru [23]:

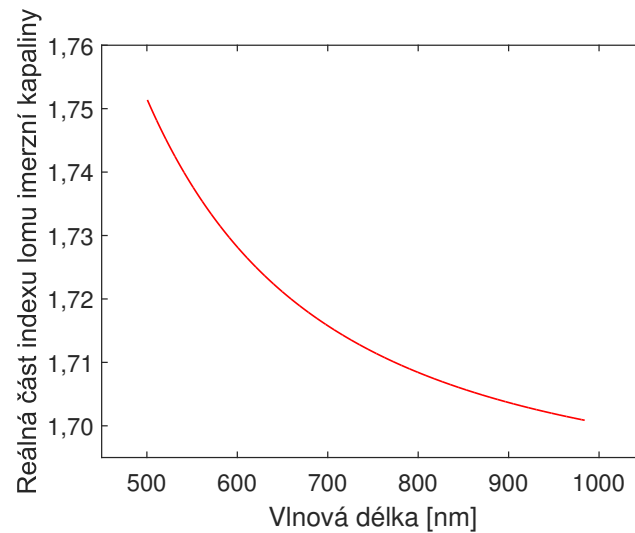
$$n = A + B\lambda^{-2} + C\lambda^{-4}, \quad (6.5)$$

kde λ je vlnová délka v nm a A , B a C jsou Cauchyho koeficienty. Jejich hodnoty udávány výrobcem při teplotě 25°C jsou uvedeny v tabulce (6.3).

<i>Koeficient</i>	<i>Hodnota</i>	<i>Jednotka</i>
<i>A</i>	1,688	<i>l.j.</i>
<i>B</i>	$1,119 \times 10^4$	nm^2
<i>C</i>	$1,171 \times 10^9$	nm^4

Tabulka 6.3: Koeficienty Cauchyho formule pro imerzní kapalinu.

Závislost indexu lomu imerzní kapaliny na vlnové délce je zobrazena na obrázku (6.5).



Obrázek 6.5: Závislost indexu lomu imerzní kapaliny na vlnové délce.

7 Modelování v software COMSOL Multiphysics

Jev povrchové plazmonové rezonance se dá modelovat užitím metody konečných prvků (FEM) v softwaru COMSOL Multiphysics, kde vybuzení povrchových plazmonů lze sledovat například určením průběhu elektrického nebo magnetického pole na rozhraní kovu a dielektrika, závislosti odrazivosti na úhlu dopadu na plazmonickou strukturu a nebo spektrální závislosti odrazivosti. V této části práce jsou uvedeny příklady vybuzení povrchových plazmonů v SPR systému sedmi vrstev použitím softwaru COMSOL Multiphysics.

7.1 Metoda konečných prvků (FEM)

Metoda konečných prvků je numerická metoda [24], kterou lze využít k aproximaci řešení fyzikálních úloh, kde se vyjadřuje prostorová nebo časová závislost veličin pomocí parciálních diferenciálních rovnic, které se v procesu využití této metody redukují na algebraický systém rovnic. Výhodou této metody je možnost její aplikace, kde na rozdíl od analytického řešení, které je omezeno na jednodušší geometrii a jednoduché hraniční podmínky, lze řešit složitější fyzikální problémy rozložením úlohy na elementy, ve kterých hledáme dané řešení. Počet těchto elementů ovlivňuje přesnost modelu úlohy, kde s narůstajícím počtem elementů roste výpočetní čas potřebný k získání souhrnného řešení. Obecná aplikace metody konečných prvků se dá popsat v několika krocích:

1. Rozdělení oblasti (geometrie úlohy), ve které hledáme řešení, na jednotlivé elementy.
2. Definice chování jednotlivých elementů.
3. Formulace systému rovnic, které popisují chování celého systému.
4. Aplikace počátečních a okrajových podmínek.
5. Řešení systému rovnic.

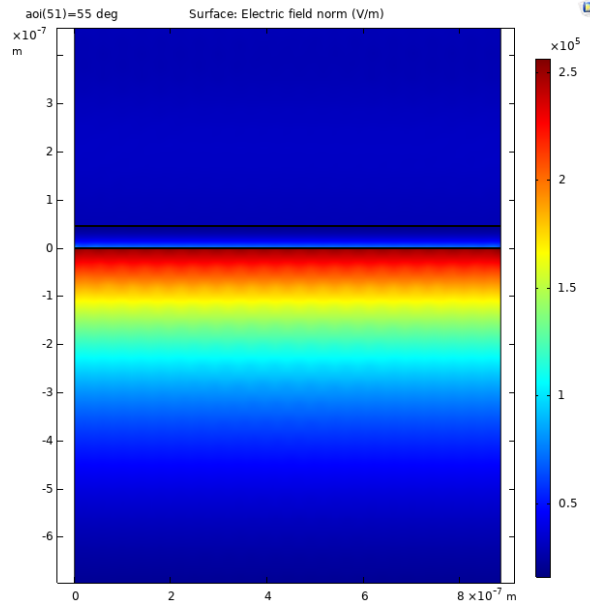
Modelování vybuzení povrchových plazmonů užitím metody konečných prvků bylo uskutečněno v softwaru COMSOL Multiphysics. Model uvažuje 2D geometrii jako na obrázku (6.2). Model tedy obsahuje sedm vrstev hranol: SF10, imerzní kapalina, substrát SF10, adhezní vrstva chromu, budící vrstva zlata, efektivní prostředí a analyt, kterým je voda. Disperzní vlastnosti a tloušťky těchto vrstev byly zadány přes globální parametry a odpovídají teoretickému modelu. Jako fyzikální interface byl zvolen *Electromagnetic Waves, Frequency Domain* k řešení Maxwellovy rovnice:

$$\nabla \times \frac{1}{\mu_r} (\nabla \times \vec{E}) - k_0^2 (\epsilon_r - \frac{j\sigma}{\omega\epsilon_0}) \vec{E} = 0 \quad (7.1)$$

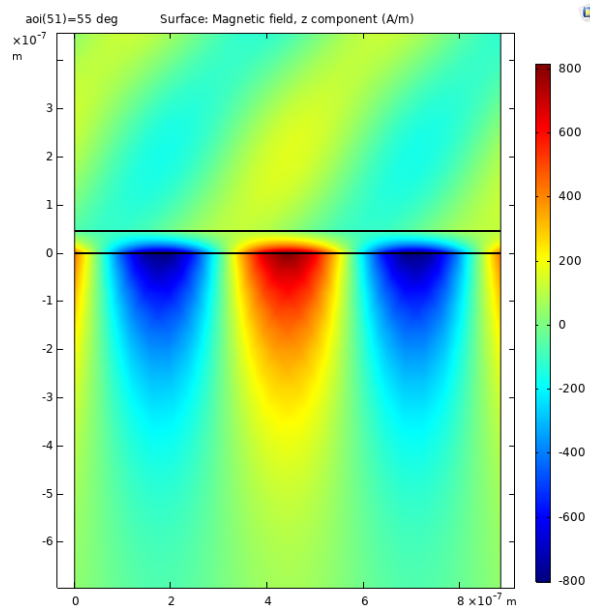
Na horní a dolní hranici struktury byl zvolen *User-defined Port*, kde na horní hranici je nastaveno "Wave excitation On" k navázání vlny do struktury a na dolní hranici "Wave excitation Off" k zabránění zpětných odrazů. Na portech nejsou tedy žádné odrazy. Vlna na horní hranici je definována jako *Magnetic mode field* $H_0 = z$ s úhlem dopadu θ a vlna na dolní hranici $H_0 = z$. Na pravé a levé straně geometrie struktury jsou aplikovány hraniční podmínky *Periodic Condition - Floquet periodicity*. K rozdělení struktury na jednotlivé elementy byl použit *User-controlled mesh*, kde *Free Triangular mesh 1* byl použit pro mesh širších vrstev hranolu SF10, substrátu SF10, budící vrstvy zlata a analytu. *Free Triangular mesh 2* byl použit pro mesh tenčích vrstev imerzní kapaliny, adhezní vrstvy chromu a efektivního prostředí, které vyžadovaly jemnější strukturu elementů.

7.2 Průběh elektrického a magnetického pole

Vybuzení povrchových plazmonů ve struktuře je znázorněno průběhem elektrického a magnetického pole. Na obrázku (7.1) je zobrazena závislost velikosti elektrického pole na souřadnicích na rozhraní kovu a dielektrika pro úhel dopadu $\theta = 55^\circ$. Na obrázku (7.2) je zobrazena závislost velikosti magnetického pole (z komponenty) na souřadnicích na rozhraní kovu a dielektrika pro úhel dopadu $\theta = 55^\circ$.



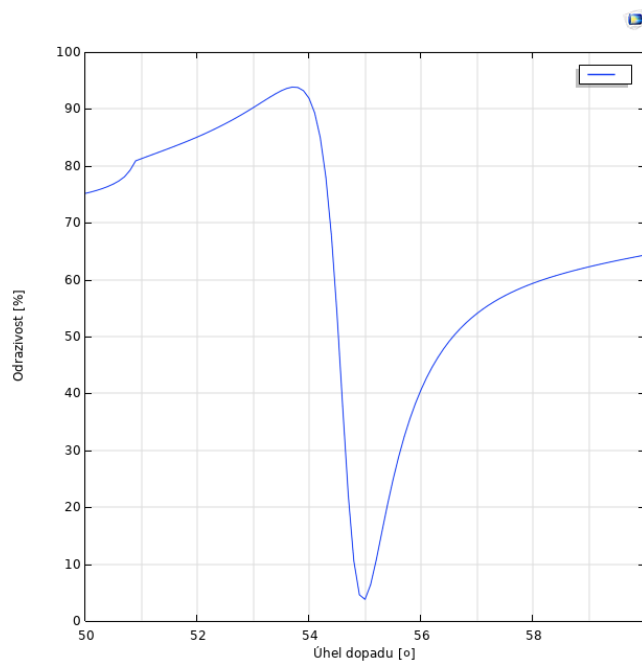
Obrázek 7.1: Závislost velikosti elektrického pole na souřadnicích na rozhraní kovu a dielektrika pro úhel dopadu $\theta = 55^\circ$.



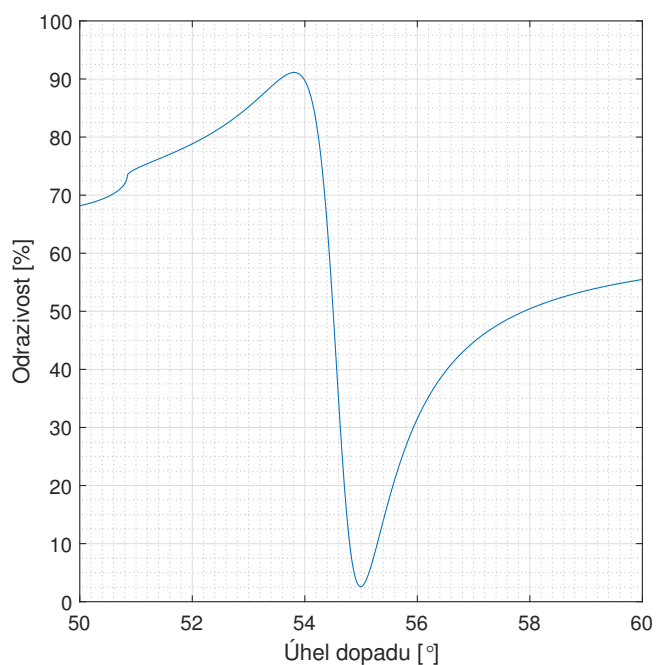
Obrázek 7.2: Závislost velikosti magnetického pole (z komponenty) na souřadnicích na rozhraní kovu a dielektrika pro úhel dopadu $\theta = 55^\circ$.

7.3 Spektrální a úhlová závislost odrazivosti

Dobrý souhlas mezi analytickým a numerickým modelem lze vidět na obrázcích (7.3) a (7.4) závislosti odrazivosti na úhlu dopadu.

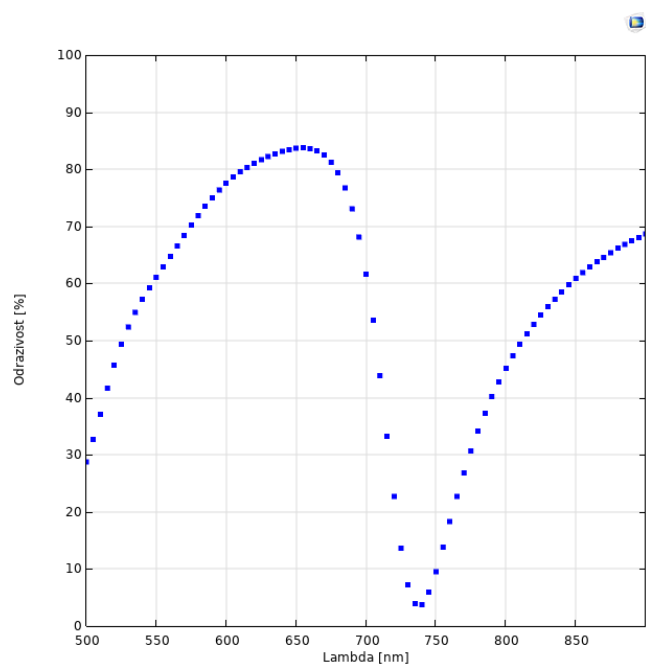


Obrázek 7.3: Závislost odrazivosti na úhlu dopadu vypočtená v softwaru COMSOL Multiphysics.

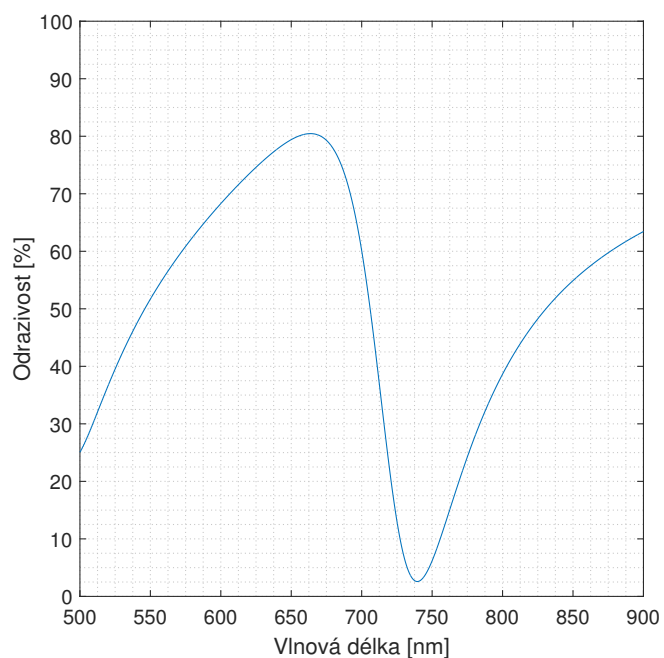


Obrázek 7.4: Závislost odrazivosti na úhlu dopadu vypočtená v softwaru MATLAB.

Dobrý souhlas mezi analytickým a numerickým modelem lze také pozorovat na obrázcích (7.5) a (7.6) závislosti odrazivosti na vlnové délce.



Obrázek 7.5: Závislost odrazivosti na vlnové délce vypočtená v softwaru COMSOL Multiphysics.



Obrázek 7.6: Závislost odrazivosti na vlnové délce vypočtená v softwaru MATLAB.

8 Experimentální část I.

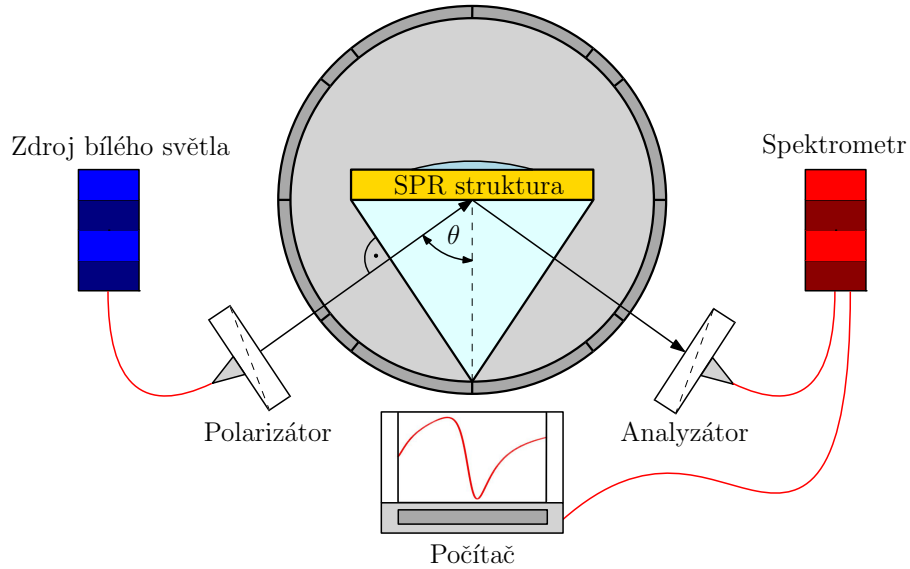
První experimentální část práce je věnována měření poměrů odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$, kde se vybudzení povrchových plazmonů projeví jako pokles odrazivosti v okolí rezonanční vlnové délky λ_r . Poměr odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ můžeme vyjádřit jako:

$$\frac{R_p(\lambda)}{R_s(\lambda)} = \frac{|r_p(\lambda)|^2}{|r_s(\lambda)|^2}, \quad (8.1)$$

kde r_p a r_s jsou Fresnelovy koeficienty odrazivosti. V rámci této práce bylo provedeno měření poměru odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ pro několik úhlů dopadu, kde předmětem zkoumání byly dva analyty vzduch a voda.

8.1 Experimentální sestava

Schématický náčrt experimentální sestavy je na obrázku (8.1). Experimentální sestava se skládá z polychromatického zdroje světla (HL-2000, Ocean Optics), kolimátoru, polarizátoru (LP-VIS050, Thorlabs), úhlové desky opatřené goniometrem, analyzátoru (LPVIS050, Thorlabs), spektrometru (USB4000, Ocean Optics) a počítače.



Obrázek 8.1: Schématický náčrt experimentální sestavy určené k měření poměru odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$.

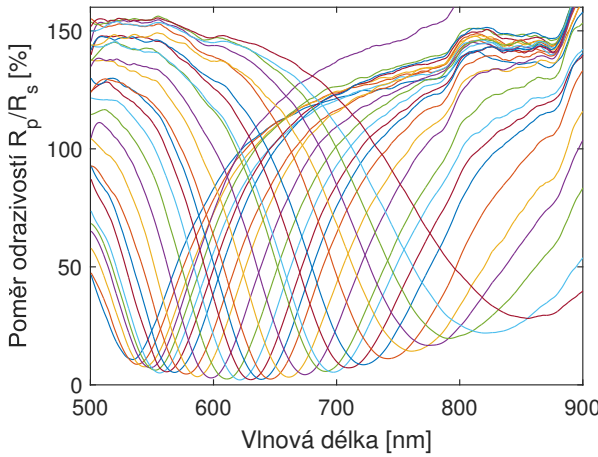
Samostatný experiment probíhá tak, že je nejprve určeno spektrum pozadí $I_{poz}(\lambda)$ při zakrytém zdroji světla. Dále je pak polychromatickým zdrojem generován bílý svazek světla, který je navázán optickým vláknem ke kolimační čočce. Kolimovaný svazek prochází polarizátorem s osou orientovanou 45° vůči rovině dopadu. Dochází tedy ke generaci s - a p -polarizované komponenty svazku, který po průchodu vazebním hrotem dopadá na SPR strukturu, kde pro p -polarizovanou komponentu dochází k zeslabenému úplnému odrazu a vybudzení povrchových plazmonů evanescentní vlnou na rozhraní kovu a analytu. Odražený svazek prochází analyzátozem, jehož osa je v prvním kroku měření nastavena kolmo k rovině dopadu pro určení spektra $I_s(\lambda)$. Ve druhém kroku měření je osa analyzátozu nastavena ve směru rovnoběžném k rovině dopadu a je změřeno spektrum $I_p(\lambda)$. Výsledná odrazivost je pak dána následujícím vztahem:

$$\frac{R_p(\lambda)}{R_s(\lambda)} = \frac{I_p(\lambda) - I_{poz}(\lambda)}{I_s(\lambda) - I_{poz}(\lambda)}. \quad (8.2)$$

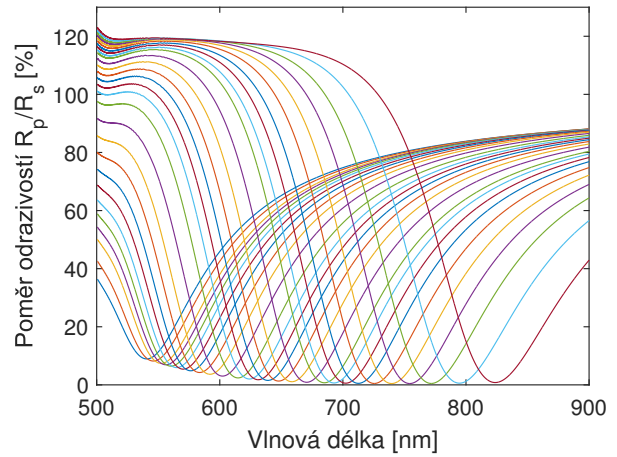
Vzhledem k tomu, že je experimentální sestava opatřena úhlovou deskou s goniometrem, tak je možné toto měření opakovat pro různé úhly dopadu. K určení úhlu dopadu na SPR strukturu θ je však nutné znát úhel dopadu na hranol α_0 , který je schématicky naznačen na obrázku (6.1). K určení tohoto úhlu se využívá referenční hodnota α_{ref} , která odpovídá hodnotě na goniometru pro nastavení, kde bílý svazek světla generovaný zdrojem dopadá kolmo na stěnu hranolu, tak jako na obrázku (8.1). V této konfiguraci pak dochází k částečnému odrazu světla na hranolu a na základě světelné stopy odraženého svazku pozorované na pozadí lze určit, kdy se stopy generovaného a odraženého svazku překryjí, tedy dojde k nastavení kolmého dopadu světelného svazku generovaného zdrojem na stranu hranolu.

8.2 Měření pro vzduch

Měření poměrů odrazivosti $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ pro vzduch bylo provedeno pro interval úhlů dopadu $36,76^\circ$ až $41,46^\circ$. Naměřené závislosti jsou vykresleny na obrázku (8.2). Pro stejný interval úhlů dopadů byly vypočteny teoretické spektrální závislosti poměrů odrazivosti $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$, které jsou vykresleny na obrázku (8.3).



Obrázek 8.2: Spektrální závislost naměřených poměrů odrazivosti pro úhly dopadu $36,76^\circ$ až $41,46^\circ$ pro vzduch.

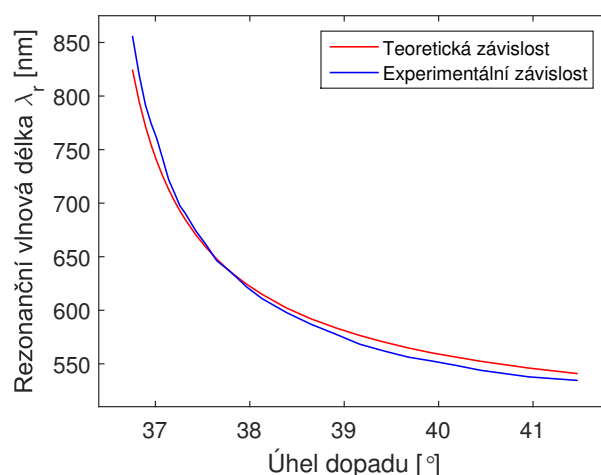


Obrázek 8.3: Spektrální závislost teoretických poměrů odrazivosti pro úhly dopadu $36,76^\circ$ až $41,46^\circ$ pro vzduch.

Při vizuálním porovnání experimentálních a teoretických závislostí, je zřejmé, že hloubka a šířka dipů experimentálních závislostí poměrů odrazivosti $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ ve spektrální oblasti $[500, 700]$ nm přibližně odpovídá teoretickým hodnotám. Avšak pokud se blížíme do blízké infračervené spektrální oblasti, tak lze pozorovat na experimentálních závislostech poměrů odrazivosti $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ postupné rozšiřování dipů a nárůst odrazivosti, který se u teoretických závislostí neprojevuje. Rozdíl mezi modelem a experimentem můžeme sledovat například na závislosti rezonanční vlnové délky λ_r na úhlu dopadu na plazmonickou strukturu θ , která je vykreslena na obrázku (8.4). Hodnoty úhlů dopadu na plazmonickou strukturu θ , úhlů dopadu na vazební hranol α_0 , experimentálních a teoretických rezonančních vlnových délek λ_r a jejich rozdílů $|\Delta\lambda_r|$ jsou vypsány v tabulce (8.1).

$\theta[deg]$	$\alpha_0[deg]$	Model $\lambda_r[nm]$	Experiment $\lambda_r[nm]$	$ \Delta\lambda_r [nm]$
41,46	33,5	540,93	534,55	6,38
40,95	34,5	546,07	537,85	8,22
40,44	35,5	552,42	544,01	8,41
40,18	36,0	556,31	548,53	7,78
39,93	36,5	560,19	552,63	7,56
39,68	37,0	564,88	556,31	8,57
39,42	37,5	570,38	562,03	8,35
39,16	38,0	576,47	568,34	8,13
38,90	38,5	583,77	577,89	5,88
38,65	39,0	592,06	587,01	5,05
38,39	39,5	602,13	597,90	4,23
38,13	40,0	614,96	610,96	4,00
37,97	40,3	624,15	621,56	2,59
37,86	40,5	631,32	630,52	0,80
37,76	40,7	639,06	638,86	0,20
37,65	40,9	647,76	646,18	1,58
37,54	41,1	658,60	661,16	2,56
37,43	41,3	670,57	674,29	3,72
37,31	41,5	685,01	690,84	5,83
37,26	41,6	692,78	697,43	4,65
37,20	41,7	702,26	709,97	7,71
37,14	41,8	712,66	721,68	9,02
37,08	41,9	725,51	741,89	16,38
37,01	42,0	739,61	760,78	21,17
36,95	42,1	754,19	774,29	20,10
36,89	42,2	771,85	791,60	19,75
36,83	42,3	794,75	819,77	25,02
36,76	42,4	823,97	855,45	31,48

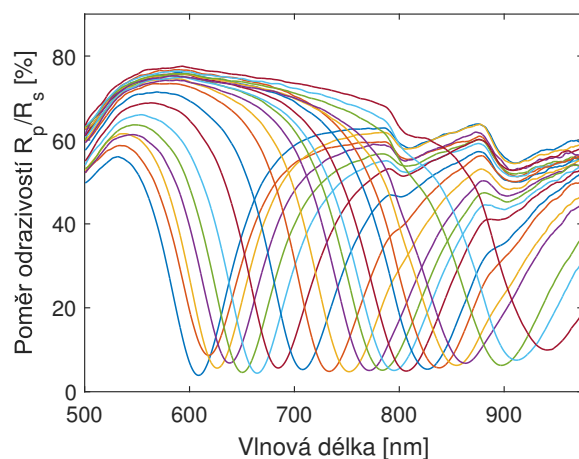
Tabulka 8.1: Hodnoty úhlů dopadu na SPR sestavu θ , na stěnu hranolu α_0 a experimentálních a teoretických hodnot rezonančních vlnových délek λ_r pro vzduch.



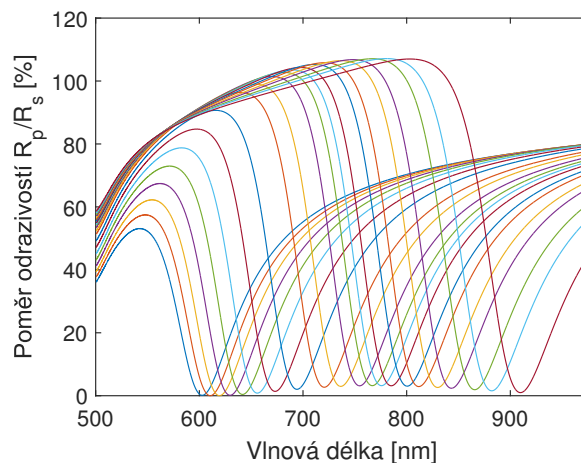
Obrázek 8.4: Srovnání experimentální a teoretické závislosti rezonanční vlnové délky λ_r na úhlu dopadu θ pro vzduch.

8.3 Měření pro vodu

Měření poměrů odrazivosti $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ pro vodu bylo provedeno pro interval úhlů dopadu $53,29^\circ$ až $60,00^\circ$. Měření však bylo provedeno na plazmonické struktuře, na které byly již měřeny různé analyty, takže struktura použitá v tomto měření měla delší historii používání. Naměřené spektrální závislosti poměrů odrazivosti $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ jsou vykresleny na obrázku (8.5). Pro stejný interval úhlů dopadů byly vypočteny teoretické spektrální závislosti poměrů odrazivosti $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$, které jsou vykresleny na obrázku (8.6).



Obrázek 8.5: Spektrální závislost naměřených poměrů odrazivosti pro úhly dopadu $53,29^\circ$ až $60,00^\circ$ pro vodu.



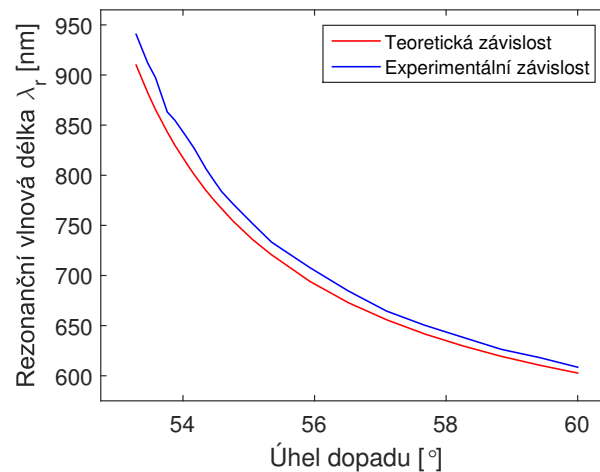
Obrázek 8.6: Spektrální závislost teoretických poměrů odrazivosti pro úhly dopadu $53,29^\circ$ až $60,00^\circ$ pro vodu.

Při vizuálním porovnání experimentálně zjištěných poměrů odrazivosti $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ k teoretickým závislostem, je patrné, že je šířka dipů teoretických závislostí ve viditelné části spektra v dobrém souhlasu s experimentem, avšak jejich pozice je posunutá ke kratším vlnovým délkám, což můžeme sledovat na obrázku (8.7) ze závislosti rezonanční vlnové délky λ_r na úhlu dopadu na SPR strukturu θ . Hodnoty úhlů dopadu na SPR strukturu θ , úhlů dopadu na vazební hranol

α_0 , experimentálních a teoretických rezonančních vlnových délek λ_r a jejich rozdílů $|\Delta\lambda_r|$ jsou vypsány v tabulce (8.2).

$\theta[deg]$	$\alpha_0[deg]$	Model $\lambda_r[nm]$	Experiment $\lambda_r[nm]$	$ \Delta\lambda_r [nm]$
60,00	0	602,73	608,55	5,82
59,42	1,0	610,56	618,16	7,60
58,84	2,0	619,36	626,34	6,98
58,26	3,0	629,73	638,27	8,54
57,68	4,0	641,63	650,33	8,70
57,10	5,0	655,85	664,50	8,65
56,51	6,0	672,92	684,62	11,70
55,93	7,0	694,13	707,85	13,72
55,35	8,0	720,72	733,33	12,61
55,05	8,5	736,19	752,11	15,92
54,76	9,0	754,38	771,48	17,10
54,58	9,3	766,98	783,98	17,00
54,47	9,5	775,59	795,12	19,53
54,35	9,7	784,91	806,56	21,65
54,17	10,0	800,48	826,70	26,22
54,05	10,2	811,89	838,15	26,26
53,88	10,5	829,80	854,74	24,94
53,76	10,7	843,21	863,15	19,94
53,58	11,0	865,48	897,32	31,84
53,46	11,2	882,18	911,82	29,64
53,29	11,5	909,90	940,61	30,71

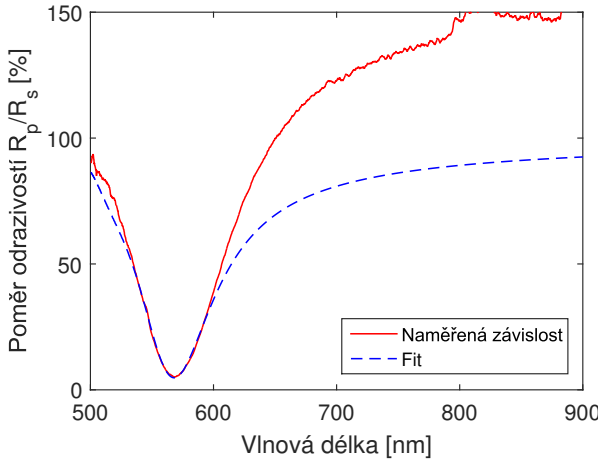
Tabulka 8.2: Hodnoty úhlů dopadu na SPR sestavu θ , na stěnu hranolu α_0 a experimentálních a teoretických hodnot rezonančních vlnových délek λ_r pro vodu.



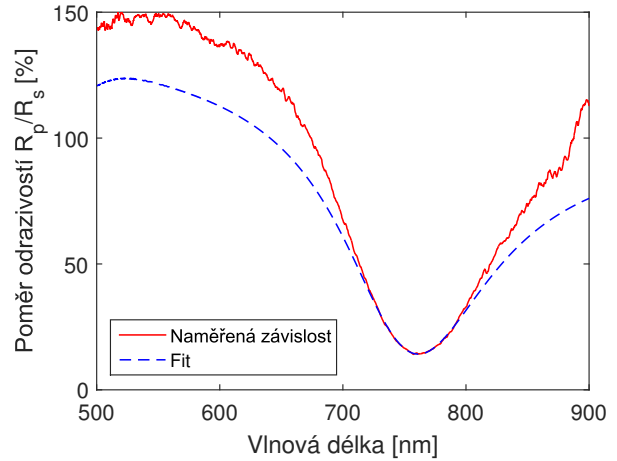
Obrázek 8.7: Srovnání experimentální a teoretické závislosti rezonanční vlnové délky λ_r na úhlu dopadu θ pro vodu.

8.4 Určení dielektrické funkce zlata z měření poměrů odrazivostí

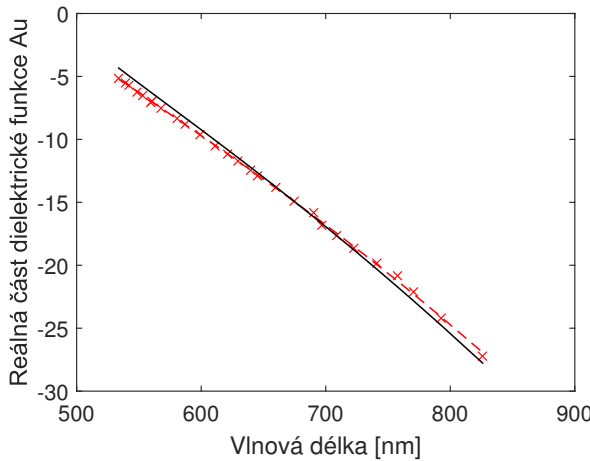
Z naměřených spektrálních závislostí poměrů odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ pro úhly dopadu v intervalu $36,76^\circ$ až $41,46^\circ$ lze určit fitováním dipů pro každou rezonanční vlnovou délku λ_r reálnou a imaginární část dielektrické funkce zlata. Naměřené spektrální závislosti poměrů odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ jsou násobeny Gaussovou funkcí, jejíž střed je umístěn v minimu funkce odrazivosti, aby byla zvýšena citlivost fitování na okolí rezonanční vlnové délky. Příklad fitování naměřených spektrálních závislostí poměrů odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ je na obrázcích (8.8) a (8.9) pro závislosti na začátku a konci měřeného spektra.



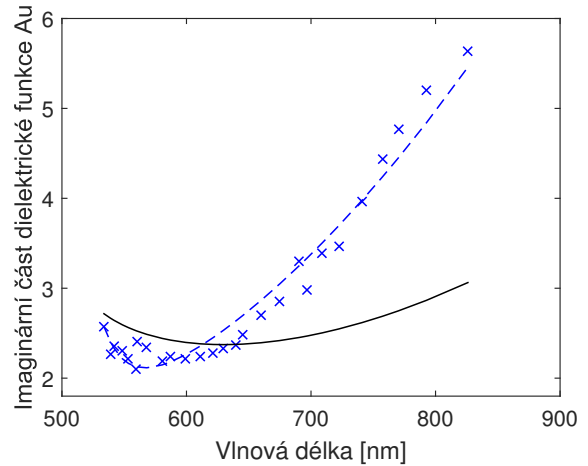
Obrázek 8.8: Experimentální závislost poměru odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ (červeně) a fit (modře) pro úhel dopadu $39,16^\circ$ pro vzduch.



Obrázek 8.9: Experimentální závislost poměru odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ (červeně) a fit (modře) pro úhel dopadu $37,01^\circ$ pro vzduch.



Obrázek 8.10: Reálná část komplexní dielektrické funkce zlata v závislosti na vlnové délce určená z elipsometrického měření (černě) v porovnání s hodnotami určenými z fitování poměrů odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ (křížky červeně) a fit Drudeho-Lorentzova modelu (červeně).



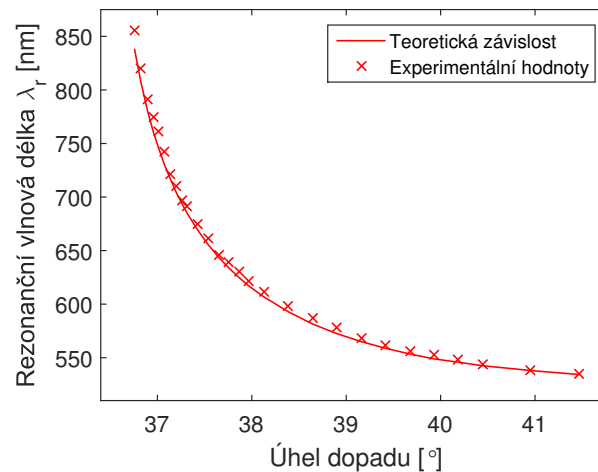
Obrázek 8.11: Imaginární část komplexní dielektrické funkce zlata v závislosti na vlnové délce určená z elipsometrického měření (černě) v porovnání s hodnotami určenými z fitování poměrů odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ (křížky modře) a fit Drudeho-Lorentzova modelu (modře).

K určení parametrů Drudeho-Lorentzova modelu (5.7) bylo využito hodnot reálných a imaginárních částí dielektrické funkce zlata určených z jednotlivých spektrálních závislostí poměrů odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$. Fitovanými parametry bylo osm parametrů: λ_p , γ_p , A_1 , λ_1 , γ_1 , A_2 , λ_2 , γ_2 Drudeho-Lorentzova modelu. Výsledná reálná a imaginární část dielektrické funkce zlata je vykreslena na obrázcích (8.10) a (8.11), kde je dána do porovnání s výsledky elipsometrického měření. Parametry Drudeho-Lorentzova modelu získané z fitování reálných a imaginárních částí dielektrické funkce zlata určených z jednotlivých spektrálních závislostí poměrů odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ jsou vypsány v tabulce (8.3), kde jsou dány do porovnání s parametry získanými z vyhodnocení elipsometrického měření.

Elipsometrické měření		Měření poměrů odrazivostí	
Konstanta	Hodnota		Jednotka
ϵ_∞	1	1	l.j.
λ_p	135,71	135,75	nm
γ_p	13819,63	5503,20	nm
A_1	7,11	7,99	l.j.
λ_1	294,24	-0,002	nm
γ_1	1134,20	7423,17	nm
A_2	0,06	0,18	l.j.
λ_2	487,20	511,42	nm
γ_2	7856,94	6016,13	nm

Tabulka 8.3: Parametry Drudeho-Lorentzova modelu zlata určené z elipsometrického měření v porovnání s parametry určenými z naměřených spektrálních závislostí poměrů odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$.

Závislost rezonanční vlnové délky λ_r na úhlu dopadu θ naměřených spektrálních závislostí poměrů odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ pro vzduch a teoretickou závislost určenou z výsledných parametrů fitu Drudeho-Lorentzova modelu lze vidět na obrázku (8.12).



Obrázek 8.12: Závislost rezonanční vlnové délky λ_r na úhlu dopadu θ naměřených spektrálních závislostí poměrů odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ pro vzduch (křížky červeně) a teoretická závislost určená z výsledných parametrů fitu Drudeho-Lorentzova modelu (červeně).

9 Experimentální část II.

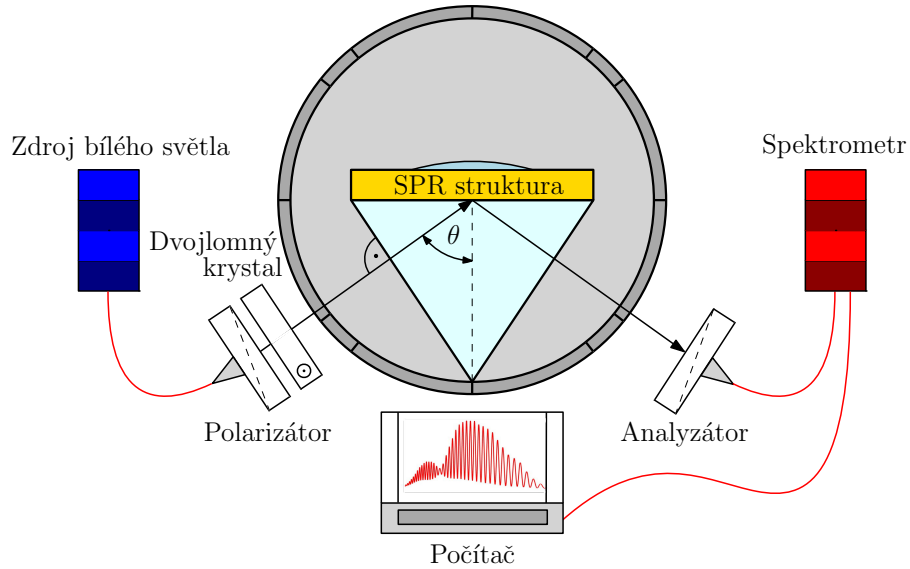
Druhá experimentální část práce je věnována měření fázového posuvu mezi p - a s -polarizovanou komponentou světla v závislosti na vlnové délce [7]:

$$\Delta(\lambda) = \delta_p(\lambda) - \delta_s(\lambda), \quad (9.1)$$

který je projevem vzniku povrchové plazmonové rezonance na rozhraní kovu a analytu. V rámci této práce bylo provedeno měření fázového posuvu $\Delta(\lambda)$ pro několik úhlu dopadu pro dva analyty vzduch a vodu.

9.1 Experimentální sestava

Schématický náčrt experimentální sestavy je na obrázku (9.1). Experimentální sestava je složena ze stejných komponent jako při měření poměrů odrazivosti $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ až na dvojlomný krystal, který slouží k vytvoření fázového rozdílu mezi p a s polarizací, což umožňuje generaci spektrálního interferogramu.



Obrázek 9.1: Schématický náčrt experimentální sestavy určené k měření fázového posuvu $\Delta(\lambda)$.

Průběh experimentu je také obdobný, avšak při měření fázového posuvu $\Delta(\lambda)$ je osa analyzátoru pootočena o 45° vůči rovině dopadu, aby došlo k průmětu p - a s -polarizované komponenty svazku do jedné roviny, ve které mohou následně interferovat. Výsledným signálem detekovaným na spektrometru bude tedy interferogram. K určení fázového posuvu $\Delta(\lambda)$ způsobeného vybuzením povrchových plazmonů je třeba zaznamenat referenční interferogram, kde pro výsledný fázový posuv bude platit:

$$\Delta(\lambda) = \delta(\lambda) - \delta_{ref}(\lambda). \quad (9.2)$$

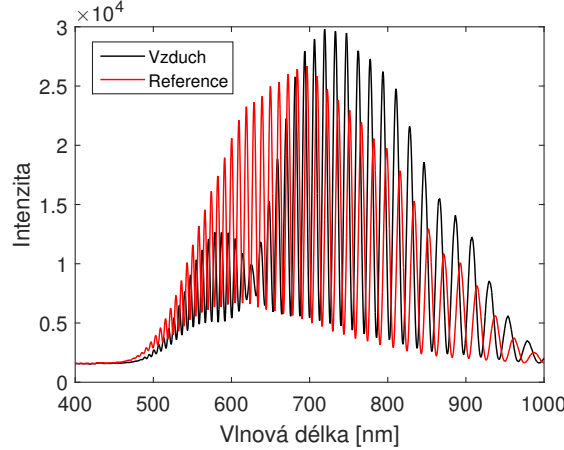
Referenční interferogram můžeme vyjádřit jako:

$$I_{ref}(\lambda) = I_{0ref}(\lambda)[1 + V_{ref}(\lambda) \cos(\Phi_{DK}(\lambda) + \delta_{ref}(\lambda))], \quad (9.3)$$

kde $I_{0ref}(\lambda)$ je referenční nemodulované spektrum, $V_{ref}(\lambda)$ je člen viditelnosti, $\Phi_{DK}(\lambda)$ je fázový rozdíl způsobený dvojlovným krystalem a $\delta_{ref}(\lambda)$ je referenční fázový rozdíl mezi p - a s -polarizovanými komponentami. Obdobně pak můžeme vyjádřit interferogram pro měření, kde dochází k vybuzení povrchových plazmonů:

$$I_{SPR}(\lambda) = I_0(\lambda)[1 + V(\lambda) \cos(\Phi_{DK}(\lambda) + \delta(\lambda))]. \quad (9.4)$$

Příkladem naměřených dat při fázovém měření jsou spektrální interferogramy na obrázku (9.2).



Obrázek 9.2: Spektrální interferogram vzniku povrchových plazmonů pro vzduch (černá) a referenční spektrální interferogram (červená).

K extrakci informace o fázi $\phi(x)$ z naměřeného interferogramu $f(x)$ lze využít WFT (Windowed Fourier Transform). WFT a inverzní WFT mohou být vyjádřeny jako [26]:

$$F(u, \xi) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)g(x-u)\exp(-j\xi x)dx, \quad (9.5)$$

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} F(u, \xi)g(x-u)\exp(-j\xi x)d\xi du, \quad (9.6)$$

kde $g(x-u)$ představuje okno, kterým může být například Gaussova funkce $g(x) = \exp(-x^2/2\sigma^2)$, kde parametr σ určuje šířku okna. Kombinací rovnic (9.5) a (9.6) dostáváme vztah:

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} [f(x) \otimes h(x, \xi)] \otimes h(x, \xi)d\xi, \quad (9.7)$$

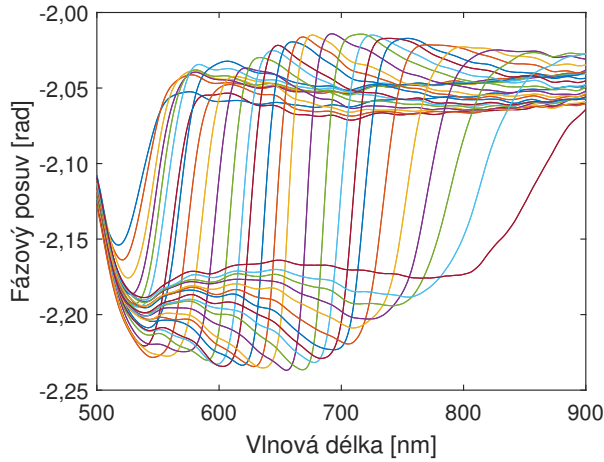
kde \otimes je označení konvoluce a $h(x, \xi) = g(x)\exp(j\xi x)$. K omezení jen na určitou část spektra se do rovnice (9.7) nastaví integrační meze od a do b a dále se zavádí prahování, kde hodnoty $[f(x) \otimes h(x, \xi)]$ menší než určitý práh, jsou brány jako šum. Výsledný vztah můžeme zapsat ve tvaru:

$$\bar{f}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_a^b [\overline{f(x) \otimes h(x, \xi)}] \otimes h(x, \xi)d\xi, \quad (9.8)$$

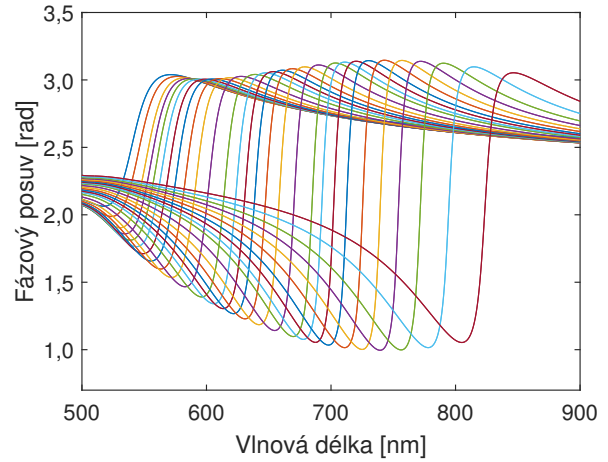
kde fáze $\phi(x)$ může být extrahována ze $\bar{f}(x) = |\bar{f}(x)|\exp(i\phi(x))$ v softwaru MATLAB funkcí $\phi(x) = \text{angle}[\bar{f}(x)]$.

9.2 Měření pro vzduch

Měření fázového posuvu $\Delta(\lambda)$ pro vzduch bylo provedeno pro interval úhlů dopadu $36,76^\circ$ až $41,46^\circ$. Experimentálně zjištěné závislosti fázového posuvu v závislosti na vlnové délce jsou vykresleny na obrázku (9.3). Pro stejný interval hodnot úhlů dopadů byly vypočteny teoretické spektrální závislosti fázového posuvu, které jsou vykresleny na obrázku (9.4).

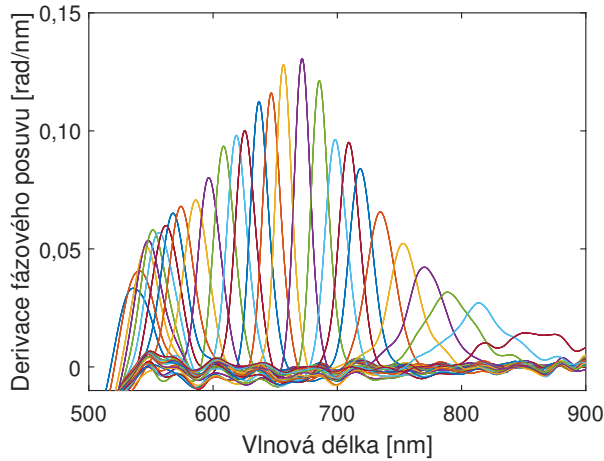


Obrázek 9.3: Naměřený fázový posuv pro úhly dopadu $36,76^\circ$ až $41,46^\circ$ pro vzduch.

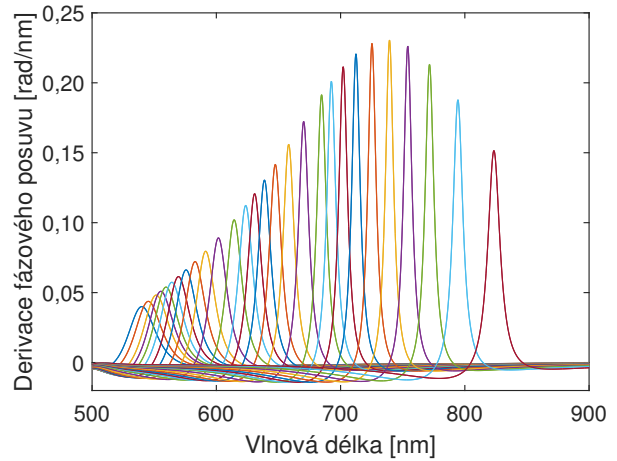


Obrázek 9.4: Teoretický fázový posuv pro úhly dopadu $36,76^\circ$ až $41,46^\circ$ pro vzduch.

K vyhodnocení měření fázového posuvu $\Delta(\lambda)$ lze využít derivace fázového posuvu $d\Delta(\lambda)/d\lambda$, kde maximum derivačního píku odpovídá rezonanční vlnové délce λ_r . Derivace fázového posuvu experimentálních a teoretických závislostí jsou vykresleny na obrázcích (9.5) a (9.6).



Obrázek 9.5: Derivace fázového posuvu experimentálních závislostí pro úhly dopadu $36,76^\circ$ až $41,46^\circ$ pro vzduch.



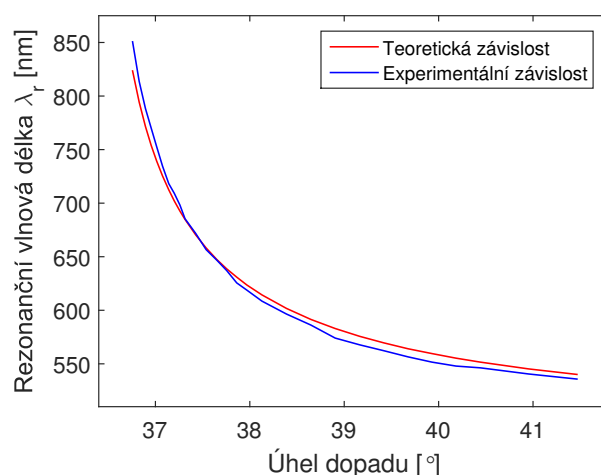
Obrázek 9.6: Derivace fázového posuvu teoretických závislostí pro úhly dopadu $36,76^\circ$ až $41,46^\circ$ pro vzduch.

Rozdíl mezi modelem a experimentem můžeme sledovat na závislosti úhlu dopadu na plazmonickou strukturu θ na rezonanční vlnové délce λ_r , která je vykreslena na obrázku (9.7). Hodnoty úhlů dopadu na plazmonickou strukturu θ , úhlů dopadu na vazební hranol α_0 , experimentálních

a teoretických rezonančních vlnových délek λ_r a jejich rozdílů $|\Delta\lambda_r|$ jsou vypsány v tabulce (9.1).

$\theta[deg]$	$\alpha_0[deg]$	Model $\lambda_r[nm]$	Experiment $\lambda_r[nm]$	$ \Delta\lambda_r [nm]$
41,46	33,5	540,11	535,79	4,32
40,95	34,5	545,25	540,52	4,73
40,44	35,5	551,60	546,27	5,33
40,18	36,0	555,29	547,91	7,38
39,93	36,5	559,58	551,60	7,98
39,68	37,0	564,07	556,51	7,56
39,42	37,5	569,56	562,23	7,33
39,16	38,0	575,66	567,73	7,93
38,90	38,5	582,96	574,04	8,92
38,65	39,0	591,45	586,20	5,25
38,39	39,5	601,73	596,49	5,24
38,13	40,0	614,36	608,55	5,81
37,97	40,3	623,55	618,76	4,79
37,86	40,5	630,92	625,55	5,37
37,76	40,7	638,66	637,08	1,58
37,65	40,9	647,37	646,78	0,59
37,54	41,1	658,21	656,64	1,57
37,43	41,3	670,37	671,74	1,37
37,31	41,5	684,81	685,40	0,59
37,26	41,6	692,58	698,20	5,62
37,20	41,7	702,07	709,20	7,13
37,14	41,8	712,47	718,23	5,76
37,08	41,9	725,32	734,47	9,15
37,01	42,0	739,42	752,87	13,45
36,95	42,1	754,00	770,17	16,17
36,89	42,2	771,48	788,26	16,78
36,83	42,3	794,38	813,73	19,35
36,76	42,4	823,42	850,60	27,18

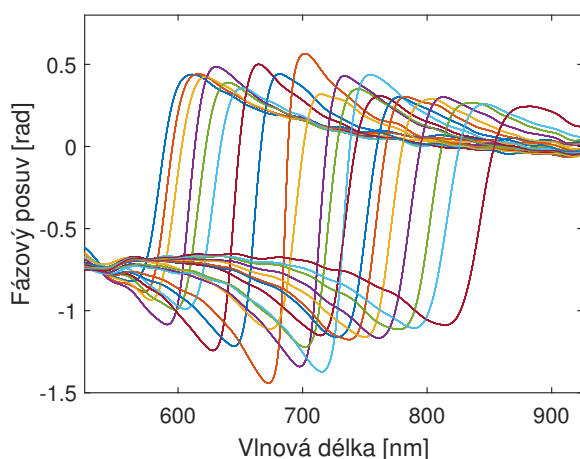
Tabulka 9.1: Hodnoty úhlů dopadu na SPR sestavu θ , na stěnu hranolu α_0 a experimentálních a teoretických hodnot rezonančních vlnových délek λ_r pro vzduch.



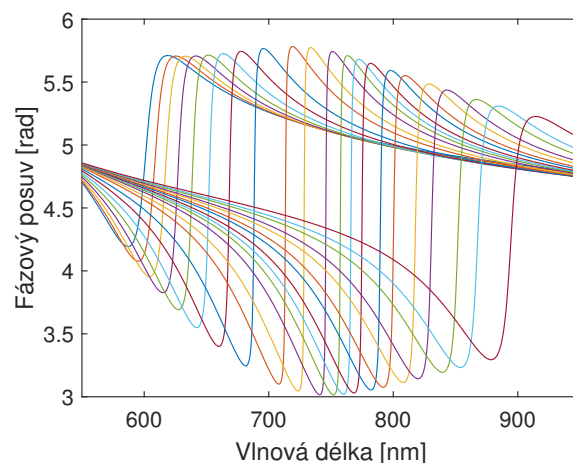
Obrázek 9.7: Srovnání experimentální a teoretické závislosti rezonanční vlnové délky λ_r na úhlu dopadu θ pro vzduch.

9.3 Měření pro vodu

Měření fázového posuvu $\Delta(\lambda)$ pro vodu bylo provedeno pro interval úhlů dopadu $53,29^\circ$ až $60,00^\circ$. Měření však bylo provedeno na plazmonické struktuře, na které byly již měřeny různé analyty, takže struktura použitá v tomto měření měla delší historii používání. Experimentálně zjištěné závislosti fázového posuvu v závislosti na vlnové délce jsou vykresleny na obrázku (9.8). Pro stejný interval hodnot úhlů dopadu byly vypočteny teoretické spektrální závislosti fázového posuvu, které jsou vykresleny na obrázku (9.9).

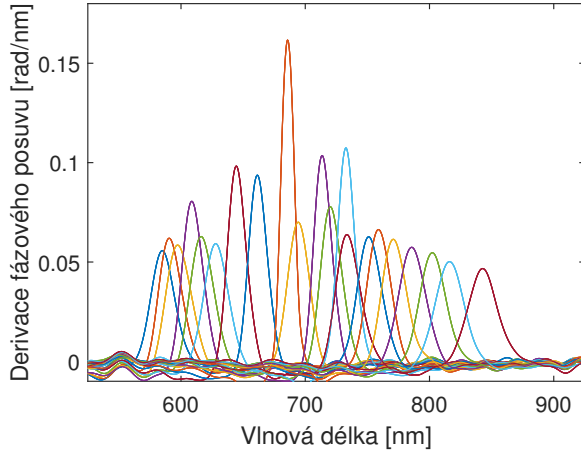


Obrázek 9.8: Naměřený fázový posuv pro úhly dopadu $53,29^\circ$ až $60,00^\circ$ pro vodu.

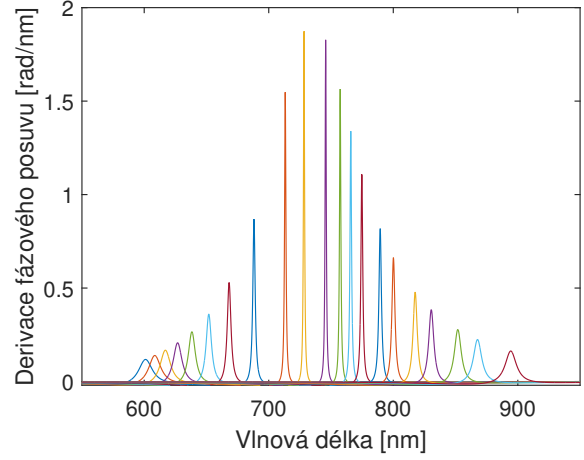


Obrázek 9.9: Teoretický fázový posuv pro úhly dopadu $53,29^\circ$ až $60,00^\circ$ pro vodu.

K vyhodnocení měření fázového posuvu $\Delta(\lambda)$ je využito derivace fázového posuvu $d\Delta(\lambda)/d\lambda$, kde maximum derivačního píku odpovídá rezonanční vlnové délce λ_r . Derivace fázového posuvu experimentálních a teoretických závislostí jsou vykresleny na obrázcích (9.10) a (9.11). Rozdíl mezi modelem a experimentem můžeme sledovat na závislosti úhlu dopadu na plazmonickou strukturu θ na rezonanční vlnové délce λ_r , která je vykreslena na obrázku (9.12).



Obrázek 9.10: Derivace fázového posuvu experimentálních závislostí pro úhly dopadu $53,29^\circ$ až $60,00^\circ$ pro vodu.

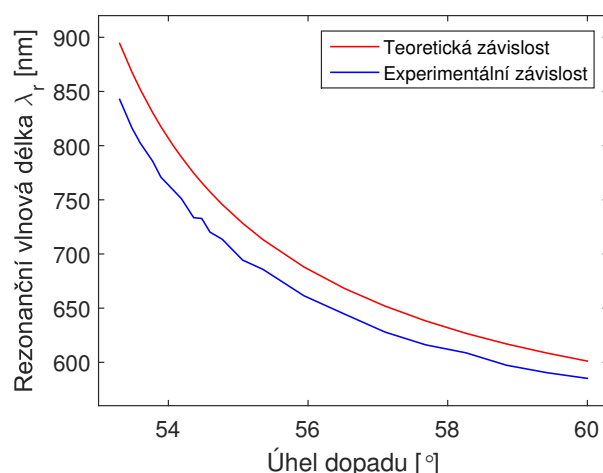


Obrázek 9.11: Derivace fázového posuvu teoretických závislostí pro úhly dopadu $53,29^\circ$ až $60,00^\circ$ pro vodu.

Hodnoty úhlů dopadu na plazmonickou strukturu θ , úhlů dopadu na vazební hranol α_0 , experimentálních a teoretických rezonančních vlnových délek λ_r a jejich rozdílů $|\Delta\lambda_r|$ jsou vypsány v tabulce (9.2).

$\theta[deg]$	$\alpha_0[deg]$	Model $\lambda_r[nm]$	Experiment $\lambda_r[nm]$	$ \Delta\lambda_r [nm]$
60,00	0	601,12	585,19	15,93
59,42	1,0	608,55	590,44	18,11
58,84	2,0	616,96	597,30	19,66
58,26	3,0	626,74	608,75	17,99
57,68	4,0	638,27	616,16	22,11
57,10	5,0	651,91	627,94	23,97
56,51	6,0	668,22	644,60	23,62
55,93	7,0	688,12	661,55	26,57
55,35	8,0	713,24	685,79	27,45
55,05	8,5	728,37	694,33	34,04
54,76	9,0	745,68	713,62	32,06
54,58	9,3	757,39	720,15	37,24
54,47	9,5	765,86	732,76	33,10
54,35	9,7	774,66	733,52	41,14
54,17	10,0	789,56	751,17	38,39
54,05	10,2	800,11	759,09	41,02
53,88	10,5	817,57	770,92	46,65
53,76	10,7	830,53	785,66	44,87
53,58	11,0	851,86	802,32	49,54
53,46	11,2	867,62	816,11	51,51
53,29	11,5	894,34	842,67	51,67

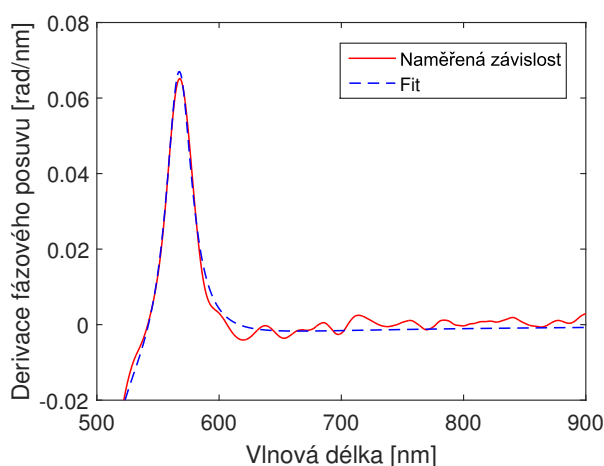
Tabulka 9.2: Hodnoty úhlů dopadu na SPR sestavu θ , na stěnu hranolu α_0 a experimentálních a teoretických hodnot rezonančních vlnových délek λ_r pro vodu.



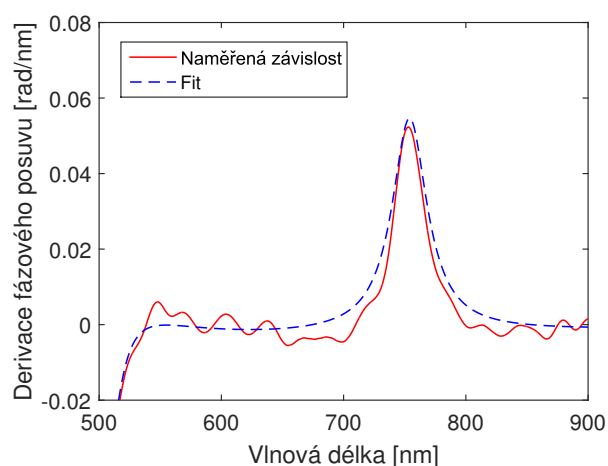
Obrázek 9.12: Srovnání experimentální a teoretické závislosti rezonanční vlnové délky λ_r na úhlu dopadu θ pro vodu.

9.4 Určení dielektrické funkce zlata z měření fázového posuvu

Při numerické derivaci spektrálních závislostí fázového posuvu $\Delta(\lambda)$ pro úhly dopadu v intervalu $36,76^\circ$ až $41,46^\circ$ lze určit fitováním maxim derivací fázových posuvů $d\Delta(\lambda)/d\lambda$ pro každou rezonanční vlnovou délku λ_r reálnou a imaginární část dielektrické funkce zlata [25]. Příklad fitování naměřených spektrálních závislostí derivací fázových posuvů $d\Delta(\lambda)/d\lambda$ je na obrázcích (9.13) a (9.14) pro závislosti na začátku a konci měřeného spektra.



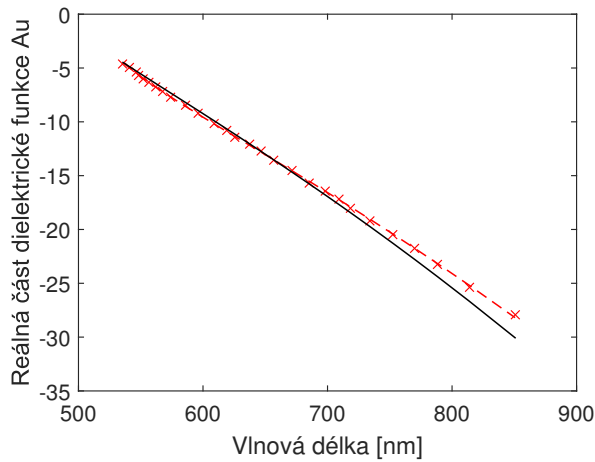
Obrázek 9.13: Experimentální závislost derivace fázového posuvu $d\Delta(\lambda)/d\lambda$ (červeně) a fit (modře) pro úhel dopadu $39,16^\circ$ pro vzduch.



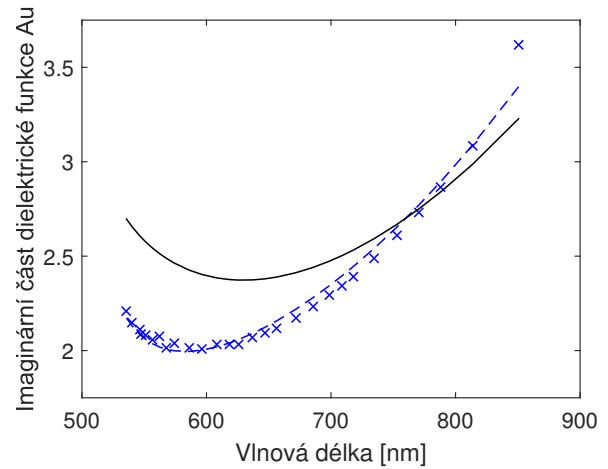
Obrázek 9.14: Experimentální závislost derivace fázového posuvu $d\Delta(\lambda)/d\lambda$ (červeně) a fit (modře) pro úhel dopadu $37,01^\circ$ pro vzduch.

K určení parametrů Drudeho-Lorentzova modelu (5.7) bylo využito hodnot reálných a imaginárních částí dielektrické funkce zlata určených z jednotlivých spektrálních závislostí derivací fázových posuvů $d\Delta(\lambda)/d\lambda$. Fitovanými parametry bylo osm parametrů: λ_p , γ_p , A_1 , λ_1 , γ_1 , A_2 ,

λ_2 , γ_2 Drudeho-Lorentzova modelu. Výsledná reálná a imaginární část dielektrické funkce zlata je vykreslena na obrázcích (9.15) a (9.16), kde je dána do porovnání s výsledky elipsometrického měření.



Obrázek 9.15: Reálná část komplexní dielektrické funkce zlata v závislosti na vlnové délce určená z elipsometrického měření (černě) v porovnání s hodnotami určenými z fitování derivací fázových posuvů $d\Delta(\lambda)/d\lambda$ (křížky červeně) a fit Drudeho-Lorentzova modelu (červeně).



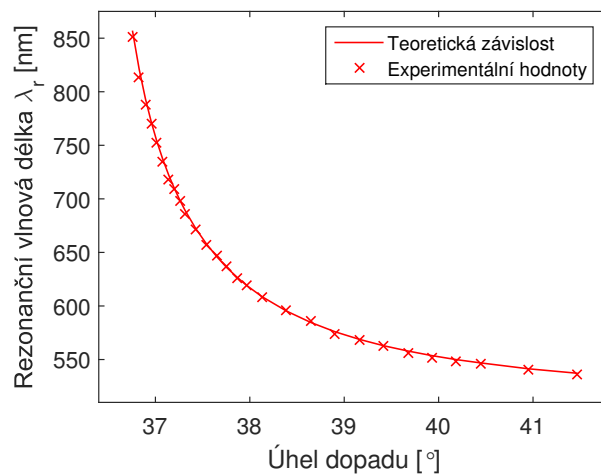
Obrázek 9.16: Imaginární část komplexní dielektrické funkce zlata v závislosti na vlnové délce určená z elipsometrického měření (černě) v porovnání s hodnotami určenými z fitování derivací fázových posuvů $d\Delta(\lambda)/d\lambda$ (křížky modře) a fit Drudeho-Lorentzova modelu (modře).

Parametry Drudeho-Lorentzova modelu získané z fitování reálných a imaginárních částí dielektrické funkce zlata určených z jednotlivých spektrálních závislostí derivací fázových posuvů $d\Delta(\lambda)/d\lambda$ jsou vypsány v tabulce (9.3), kde jsou dány do porovnání s parametry získanými z vyhodnocení elipsometrického měření.

Elipsometrické měření		Měření fázových posuvů	
Konstanta	Hodnota		Jednotka
ϵ_∞	1	1	l.j.
λ_p	135,71	143,26	nm
γ_p	13819,63	10839,38	nm
A_1	7,11	4,37	l.j.
λ_1	294,24	68,73	nm
γ_1	1134,20	39,91	nm
A_2	0,06	1,08	l.j.
λ_2	487,20	463,26	nm
γ_2	7856,94	12545,39	nm

Tabulka 9.3: Parametry Drudeho-Lorentzova modelu zlata určené z elipsometrického měření v porovnání s parametry určenými z naměřených spektrálních závislostí derivací fázových posuvů $d\Delta(\lambda)/d\lambda$.

Závislost rezonanční vlnové délky λ_r na úhlu dopadu θ naměřených spektrálních závislostí derivací fázových posuvů $d\Delta(\lambda)/d\lambda$ pro vzduch a teoretickou závislost určenou z výsledných parametrů fitu Drudeho-Lorentzova modelu lze vidět na obrázku (8.12).



Obrázek 9.17: Závislost rezonanční vlnové délky λ_r na úhlu dopadu θ naměřených spektrálních závislostí derivací fázových posuvů $d\Delta(\lambda)/d\lambda$ pro vzduch (křížky červeně) a teoretická závislost určená z výsledných parametrů fitu Drudeho-Lorentzova modelu (červeně).

10 Diskuze výsledků experimentu

V této části práce bude uvedeno shrnutí experimentu a možné příčiny neshody mezi experimentem a teoretickým modelem. Experimentální část práce je rozdělena na dvě části. První část experimentu je věnována měření poměrů odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$, kde zkoumanými analyty jsou vzduch a voda. Druhá část experimentu je věnována měření fázového posuvu $\Delta(\lambda)$ pro analyty vzduch a vodu.

Měření poměrů odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ pro vzduch bylo provedeno pro úhly dopadu na plazmonickou strukturu θ v rozmezí $36,76^\circ$ až $41,46^\circ$, kde nejlepší shody mezi teoretickým modelem a experimentem bylo dosaženo pro úhly dopadu $37,54^\circ$ až $37,97^\circ$, které odpovídají rezonančním vlnovým délkám 624,15 nm až 658,60 nm. Experimentální hodnoty rezonančních vlnových délek λ_r jsou v dobrém souhlasu s teoretickými hodnotami ve spektrální oblasti [500, 700] nm. Avšak pokud se blížíme do blízké infračervené oblasti, tak rozdíl mezi experimentálními a teoretickými hodnotami se začíná značně lišit.

Měření poměrů odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ pro vodu bylo provedeno pro úhly dopadu na plazmonickou strukturu θ v rozmezí $53,29^\circ$ až $60,00^\circ$. Při porovnání experimentální a teoretické závislosti rezonanční vlnové délky λ_r na úhlu dopadu na plazmonickou strukturu θ lze pozorovat posuv experimentálních hodnot rezonančních vlnových délek k delším vlnovým délkám v porovnání s teoretickými hodnotami. Měření však bylo provedeno na plazmonické struktuře, na které již byly měřeny různé analyty, což mohlo způsobit danou neshodu mezi experimentem a teoretickým modelem.

Měření fázového posuvu $\Delta(\lambda)$ pro vzduch bylo provedeno pro úhly dopadu na plazmonickou strukturu θ v rozmezí $36,76^\circ$ až $41,46^\circ$. Nejlepší shody mezi teoretickým modelem a experimentem bylo dosaženo pro úhly dopadu $37,31^\circ$ až $37,76^\circ$, které odpovídají rezonančním vlnovým délkám 638,66 nm až 684,81 nm. Experimentální hodnoty rezonančních vlnových délek λ_r jsou v dobrém souhlasu s teoretickými hodnotami ve spektrální oblasti [500, 700] nm. Avšak pro delší vlnové délky dochází k nárůstu rozdílu hodnot rezonančních vlnových délek mezi experimentem a teoretickým modelem.

Měření fázového posuvu $\Delta(\lambda)$ pro vodu bylo provedeno pro úhly dopadu na plazmonickou strukturu θ v rozmezí $53,29^\circ$ až $60,00^\circ$. Z výsledku experimentu je zřejmý posuv experimentálních hodnot rezonančních vlnových délek ke kratším vlnovým délkám v porovnání s teoretickými hodnotami. Plazmonická struktura, na které bylo měření provedeno, měla historii měření s různými kapalnými analyty, což mohlo způsobit nesouhlas mezi experimentem a teoretickým modelem.

Možné příčiny neshody mezi experimentem a teoretickým modelem:

- Historie povrchu zlata.
- Citlivost na úhel dopadu se mění v celém měřeném spektrálním rozsahu.
- Široká oblast měření na zlaté vrstvě (různá místa dopadu).
- Teplotní závislost optických vlastností.

Hlavní příčinou nesouhlasu experimentu s teoretickým modelem je historie povrchu zlata, což je patrné z měření poměru odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ a fázového posuvu $\Delta(\lambda)$ pro vodu, kde byla použita plazmonická struktura s dlouhou historií používání k měření kapalných analytů. Měření poměru odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ a fázového posuvu $\Delta(\lambda)$ pro vzduch bylo provedeno na nové plazmonické struktuře, kde bylo dosaženo dobrého souhlasu mezi experimentální a teoretickou

závislostí rezonanční vlnové délky λ_r na úhlu dopadu na plazmonickou strukturu θ ve spektrální oblasti [500, 700] nm.

Při odečítání úhlu na úhlové desce opatřené goniometrem je nejmenší nastavitelný dílek desetina stupně. Pro experimentálně zjištěné závislosti poměrů odrazivostí $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ z tabulky (8.1) vyplývá, že při změně úhlu dopadu na stěnu hranolu α_0 o jeden stupeň dochází v krátkovlnné části měřeného spektra ke změně rezonanční vlnové délky $\delta\lambda_r = 3,3$ nm, zatímco při změně úhlu dopadu na stěnu hranolu α_0 o jednu desetinu stupně dochází v dlouhovlnné části měřeného spektra ke změně $\delta\lambda_r = 35,68$ nm. Kvůli nelineární změně rezonanční vlnové délky se změnou úhlu dopadu na stěnu hranolu α_0 není citlivost v celém měřeném spektrálním oboru stejná a při měření v dlouhovlnné oblasti měřeného spektra jsme omezeni přesností určení úhlu dopadu na stěnu hranolu, což by mohlo být projevem nesouhlasu experimentu a teoretického modelu v blízké infračervené oblasti.

Vzhledem k tomu, že se jedná o úhlové měření, je třeba nastavit referenční úhel α_{ref} , který odpovídá hodnotě na goniometru pro nastavení, kde bílý svazek světla generovaný zdrojem dopadá kolmo na stěnu hranolu, tak jako na obrázku (8.1). Úhel dopadu na stěnu hranolu α_0 je pak určen jako úhel odečtený na goniometru, od kterého se odčítá referenční hodnota α_{ref} . Pro různé nastavení úhlu α_0 dochází na stěně hranolu k lomu světla a dochází tedy ke změně úhlu dopadu na plazmonickou strukturu. Světlo dopadající na plazmonickou strukturu tedy mění místo dopadu v závislosti na nastaveném úhlu dopadu na stěnu hranolu α_0 . Pro provedená měření, kde analytem je vzduch, je rozdíl mezi počáteční a konečnou hodnotou intervalu úhlů dopadu 4.7° . Pro provedená měření, kde analytem je voda, rozdíl činí 6.71° . Jelikož je jev povrchové plazmonové rezonance velice citlivý, tak změna místa dopadu na plazmonickou strukturu může také způsobovat rozdíl mezi experimentem a teoretickým modelem.

Velký vliv na rozdíl mezi experimentem a teoretickým modelem může mít také teplotní závislost optických vlastností. Jako příklad lze uvést vliv teploty na index lomu hranolu, což s ohledem na vztah (6.1) znamená závislost úhlu dopadu θ na teplotě. Dalším příkladem projevu teplotní závislosti optických vlastností je například měření s kapkou vody, kdy se kapka v důsledku Jouleova tepla relativně rychle vypařila. Jouleovo teplo se uvolňuje při absorpci dopadajícího světla, což znamená, že optické vlastnosti jak zlata, tak vody jsou v místě dopadu světelné vlny jiné než mimo ní.

11 Závěr

Diplomová práce byla zaměřena na charakterizaci vrstev plazmonické struktury. Součástí práce je elipsometrické měření a simulace v softwaru COMSOL Multiphysics. První kapitola práce byla věnována teorii elektromagnetického pole, kde byly odvozeny základní vztahy z Maxwellových rovnic, které slouží jako teoretický základ práce. V druhé kapitole práce byl odvozen vztah pro Drudeho model, Lorentzův oscilátor a obecný vztah pro efektivní prostředí. Obsahem čtvrté kapitoly je obecný popis jevu povrchové plazmonové rezonance, podmínek dosažení této rezonance a možnosti excitace povrchových plazmonů.

Pátá kapitola byla věnována vysvětlení základního principu elipsometrického měření, fitování naměřených dat a charakterizaci jednotlivých vrstev plazmonické struktury. Byly zde určeny optické konstanty substrátu a hranolu SF10 v softwaru COMPLETEEASE a optické konstanty spolu s tloušťky vrstvy zlata a efektivního prostředí v softwaru MATLAB pomocí funkce *fminsearch*, která je založena na Nelderově-Meadově algoritmu. Následující šestá kapitola práce obsahuje vytvoření teoretického modelu, popis plazmonické struktury sedmi vrstev v Kretschmannově uspořádání a disperzní modely pro popis optických konstant analytů a imerzní kapaliny.

Další části práce jsou simulace v software COMSOL Multiphysics, které na základě metody konečných prvků poskytují vizualizaci vybuzení povrchových plazmonů pomocí průběhu magnetického a elektrického pole na rozhraní vrstvy zlata a analytu. V závislosti na spektrální a úhlové závislosti odrazivosti byl ověřen dobrý souhlas analytického a numerického řešení.

První experimentální část práce je věnována měření spektrálních závislostí poměrů odrazivosti $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ pro analyty vzduch a vodu. Měření poměrů odrazivosti $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ pro vzduch bylo provedeno pro úhly dopadu na plazmonickou strukturu θ v rozmezí $36,76^\circ$ až $41,46^\circ$. Na základě porovnání experimentální a teoretické závislosti rezonanční vlnové délky λ_r na úhlu dopadu na plazmonickou strukturu θ , lze konstatovat, že pro úhly dopadu $37,54^\circ$ až $37,97^\circ$, které odpovídají rezonančním vlnovým délkám 624,15 nm až 658,60 nm dochází k velice dobré shodě mezi experimentem a teoretickým modelem. Avšak při měření v dlouhovlnné oblasti měřeného spektra jsme omezeni přesností určení úhlu dopadu na stěnu hranolu a pro velké změny rezonanční vlnové délky $\delta\lambda_r$ k postupnému navyšování rozdílu mezi experimentem a teoretickým modelem. Měření poměrů odrazivosti $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ pro vodu bylo provedeno pro úhly dopadu na plazmonickou strukturu θ v rozmezí $53,29^\circ$ až $60,00^\circ$. Ze závislosti rezonanční vlnové délky λ_r na úhlu dopadu na plazmonickou strukturu θ je patrný posuv experimentálních hodnot rezonančních vlnových délek k delším vlnovým délkám v porovnání s teoretickými hodnotami. Tento efekt je přisuzován historii plazmonické struktury, na které bylo měření provedeno.

Druhá experimentální část práce se zabývá měřením fázového posuvu $\Delta(\lambda)$ pro analyty vzduch a vodu. Měření fázového posuvu $\Delta(\lambda)$ pro vzduch bylo provedeno pro úhly dopadu na plazmonickou strukturu θ v rozmezí $36,76^\circ$ až $41,46^\circ$. Při porovnání experimentální a teoretické závislosti rezonanční vlnové délky λ_r na úhlu dopadu na plazmonickou strukturu θ , je zřejmé, že pro úhly dopadu $37,31^\circ$ až $37,76^\circ$, které odpovídají rezonančním vlnovým délkám 638,66 nm až 684,81 nm, dochází k velice dobré shodě mezi experimentem a teoretickým modelem. Ovšem pro delší rezonanční vlnové délky λ_r , které se blíží k blízké infračervené oblasti dochází ke stejnému efektu jako při měření poměrů odrazivosti $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ a narůstá rozdíl mezi experimentálními a teoretickými hodnotami. Měření fázového posuvu $\Delta(\lambda)$ pro vodu bylo provedeno pro úhly dopadu na plazmonickou strukturu θ v rozmezí $53,29^\circ$ až $60,00^\circ$. Zřejmý posuv experimentálních hodnot rezonančních vlnových délek ke kratším vlnovým délkám v porovnání s teoretickými hodnotami je opět přisuzován historii povrchu zlata, který byl podroben měření různých kapalných analytů.

Na základě měření spektrálních závislostí poměrů odrazivosti $R_p(\lambda)/R_s(\lambda)$ a spektrálních

závislosti fázového posuvu $\Delta(\lambda)$ pro vzduch byla určena dielektrická funkce zlata, která byla následně porovnána s dielektrickou funkcí zlata určenou ze zpracování elipsometrického měření. Z výsledků je patrné, že pro tuto metodu charakterizace zlaté vrstvy je vhodnější použít měření fázového posuvu $\Delta(\lambda)$, kvůli menší šířce derivačních píků spektrálních závislostí derivací fázových posuvů $d\Delta(\lambda)/d\lambda$ a vyšší citlivosti na určení imaginární části dielektrické funkce zlata.

V předposlední kapitole práce byla provedena diskuze výsledků experimentu, kde byly shrnuty možné problémy, zvláště ty spojené se změnou teploty, které mohou mít vliv na rozdílné výsledky mezi experimentem a teoretickým modelem. Tato konfigurace experimentu se vzhledem ke zmíněným problémům jeví jako nevhodná pro použití k měření disperze kapalných analytů. Vznikající problémy, které způsobují nesoulad experimentu a teorie, nejsou lehce řešitelné.

Výsledky této práce jsou důležité z hlediska možností charakterizace materiálů v plazmonické struktuře v Kretschmannově uspořádání. Na základě porovnání teoretických a experimentálních závislostí byl diskutován vliv historie povrchu zlaté vrstvy, citlivosti na úhel dopadu, široké oblasti měření na zlaté vrstvě a teplotní závislosti optických vlastností. Závěry plynoucí z výsledků této práce jsou důležité pro vývoj nových SPR senzorů.

Literatura

- [1] HOMOLA, J., [*Surface Plasmon Resonance Based Sensors*], Springer-Verlag, New York (2006).
- [2] PITARKE, J. M., SILKIN, V. M., CHULKOV, E. V., and ECHENIQUE, P. M., “Theory of surface plasmons and surface-plasmon polaritons,” *Rep. Prog. Phys.* **70**, 1–87 (2007).
- [3] KRETSCHMANN, E. and RAETHER, H., “Radiative decay of nonradiative surface plasmons excited by light,” *Z. Naturforschung* **A23**, 2135–2136 (1968).
- [4] GWON, H. R. and LEE, S. H., “Spectral and angular responses of surface plasmon resonance based on the Kretschmann prism configuration,” *Mater. Trans.* **51**, 1150–1155 (2010).
- [5] KOOYMAN, R. P. H., [*Physics of Surface plasmon resonance biosensors*], The Royal Society of Chemistry, Cambridge (2008).
- [6] HOMOLA, J., “Present and future of surface plasmon resonance biosensors,” *Analytical Bioanalytical Chemistry* **377**, 528–539 (2003).
- [7] HLUBINA, P., DULIAKOVA, M., KADULOVA, M., and CIPRIAN, D., “Spectral interferometry-based surface plasmon resonance sensor,” *Opt. Commun.* **354**, 240–245 (2015).
- [8] BORN, M. and WOLF, E., [*Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light (7th ed.)*], Cambridge University Press (1999).
- [9] RAETHER, H., [*Surface Plasmons on Smooth and Rough Surfaces and on Gratings*], Springer-Verlag, New York (1988).
- [10] MAIER, S. A., [*Plasmonics: Fundamentals and Applications*], Springer-Science+Business Media LLC, United Kingdom (2007).
- [11] OTTO, A., “Excitation of nonradiative surface plasma waves in silver by the method of frustrated total reflection,” *Z. für Physik* **216**, 398–410 (1968).
- [12] SHARMA, A. K., JHA, R., and GUPTA, B. D., “Fiber-optic sensors based on surface plasmon resonance: A comprehensive review,” *IEEE J. Sensors* **7**, 1118–1129 (2007).
- [13] HLUBINA, P., KADULOVA, M., CIPRIAN, D., and SOBOTA, J., “Reflection-based fibre-optic refractive index sensor using surface plasmon resonance,” *J. Europ. Opt. Soc. Rap. Public.* **9**, 14033 (2014).
- [14] NELDER, J. A. and MEAD, R., “A simplex method for function minimization,” *The Computer Journal* **7**, 308–313 (1965).
- [15] VIAL, A., GRIMAULT, A.-S., MACÍAS, D., BARCHIESI, D., and CHAPELLE, M. L. D. L., “Improved analytical fit of gold dispersion: Application to the modeling of extinction spectra with a finite-difference time-domain method,” *Phys. Rev. B* **71**, 085416 (2005).
- [16] VIAL, A. and LAROCHE, T., “Description of dispersion properties of metals by means of the critical points model and application to the study of resonant structures using the FDTD method,” *J. Phys. D: Appl. Phys.* **40**, 7152–7158 (2007).

- [17] D. E. ASPNES, J. B. T. and HOTTIER, F., “Investigation of effective-medium models of microscopic surface roughness by spectroscopic ellipsometry,” *Phys. Rev.* **20**, 3292–3302 (1979).
- [18] BARCHIESI, D. and GROSGES, T., “Fitting the optical constants of gold, silver, chromium, titanium, and aluminum in the visible bandwidth,” *J. of Nanophotonics*, *8*(1) **083097** (2014).
- [19] HLUBINA, P. and CIPRIAN, D., “Spectral phase shift of surface plasmon resonance in the Kretschmann configuration: theory and experiment,” *Plasmonics* **12**, 1071–1078 (2017).
- [20] CHYLEK, J., BEZDEKOVA, I., CIPRIAN, D., and HLUBINA, P., “Measurement of the dispersion of a liquid analyte using surface plasmon resonance: a theoretical approach,” *Proc. SPIE* **10680** (2018).
- [21] CHLEBUS, R., CHYLEK, J., CIPRIAN, D., and HLUBINA, P., “Surface plasmon resonance based measurement of the dielectric function of a thin metal film,” *Sensors* **18**(11), 3693 (2018).
- [22] DAIMON, M. and MASUMURA, A., “Measurement of the refractive index of distilled water from the near-infrared region to the ultraviolet region,” *Appl. Opt.* **46**, 3811–3820 (2007).
- [23] CARGILLE, “Catalog of characteristics of refractive index liquid,” <https://cargille.com/wp-content/uploads/2018/06/Refractive-Index-Liquid-Series-M-n-1.7300-at-589.3-nm-and-25.pdf> **1815** (2018).
- [24] JIN, J., [*The Finite Element Method in Electromagnetics*], Wiley, New Jersey (2014).
- [25] HLUBINA, P., LUNACKOVA, P., and CIPRIAN, D., “Phase sensitive measurement of the wavelength dependence of the complex permittivity of thin gold film using surface plasmon resonance,” *Opt. Mater. Express* **9**, 992–1001 (2019).
- [26] HLUBINA, P., LUŇÁČEK, J., CIPRIAN, D., and CHLEBUS, R., “Windowed Fourier transform applied in the wavelength domain to process the spectral interference signals,” *Opt. Commun.* **281**, 2349–2354 (2008).